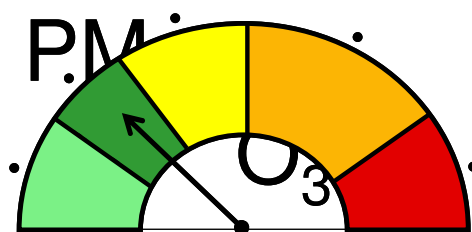




**Maria Alexandra  
Castelo Sobral  
Monteiro**

**Desenvolvimento de um sistema de avaliação e  
previsão da qualidade do ar para Portugal**





**Maria Alexandra  
Castelo Sobral  
Monteiro**

**Desenvolvimento de um sistema de avaliação e  
previsão da qualidade do ar para Portugal**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente, realizada sob a orientação científica da Doutora Ana Isabel Miranda, Professora Associada do Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro.

Apoio financeiro da Fundação da Ciência e Tecnologia e do Fundo Social Europeu no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio pela Bolsa de Doutoramento Ref<sup>a</sup> SFRH/BD/10922/2002 e ao Projecto INTERFACE ref<sup>a</sup> POCI/AMB/60660/2004.

## **o júri**

presidente

Doutora Maria Helena Vaz de Carvalho Nazaré  
Reitora da Universidade de Aveiro

Representada por  
Doutora Ana Maria Vieira da Silva Viana Cavaleiro  
Professora Catedrática da Universidade de Aveiro

Doutor Carlos Alberto Diogo Soares Borrego  
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Doutor Casimiro Adrião Pio  
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Doutora Ana Isabel Couto Neto da Silva Miranda  
Professora Associada da Universidade de Aveiro (Orientadora)

Doutor Robert Vautard  
Director do Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement - Paris -França

Doutor Miguel Sala Coutinho  
Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente  
Secretário-geral do Instituto do Ambiente e Desenvolvimento

Doutora Myriam Alexandra dos Santos Batalha Dias Nunes Lopes  
Professora Auxiliar da Universidade de Aveiro

## agradecimentos

À Professora Ana Isabel Miranda. Pelo desafio aceite e pela confiança e incentivo sempre manifestados. Pelo optimismo e calma demonstrada mesmo em períodos complicados. E pelo apoio e a orientação para o meu desenvolvimento científico.

Ao Professor Carlos Borrego. Pela confiança, dedicação e ensinamentos, sobre a vida e sobre a ciência. Pela boa disposição e disponibilidade, mesmo nos dias de apenas 24 horas. Um muito obrigado.

Ao Robert Vautard, por ser uma fonte de inspiração e admiração. Pelo seu espírito crítico, disponibilidade e pela aposta em mim.

Ao GEMAC, que me serve de casa e abrigo há mais de 7 anos e que permitiu a concretização deste objectivo servido de um bom ambiente e acompanhado de farra e diversão. A todos os colegas, mas em particular...

À Ana Cristina. Pela sua dedicação, sabedoria e humildade. E acima de tudo por estar lá, sempre. Mesmo longe.

À Helena. Pelo seu companheirismo, sapiência e maturidade. E pelo seu “abraço” às emissões!

À Anabela. Pela cumplicidade e discussões frutuozas. E pelo desabafo e amizade.

À Joana Ferreira. Pela paciência e a disciplina transmitidas.

À Vera. Pelo sorriso e a boa-disposição. Pela sua disponibilidade e vontade.

À Myriam. Pelos ensinamentos e experiência de vida, pela calma e pela resposta (ou linha a mais) sempre pronta a escrever.

Ao Pedro. Pelos telefonemas fora-de-horas, pela camaradagem e “alguma” paciência. E pela operacionalização da previsão!

Às ex-alunas de projecto Bárbara e Raquel, um obrigado por toda a ajuda prestada e pelo interesse demonstrado no trabalho.

À FCT, pelo seu contributo financeiro através da Bolsa de Doutoramento SFRH/BD/10922/02.

À Agência Portuguesa do Ambiente, pelo financiamento de protocolos que foram os alicerces deste projecto.

A todos os que, mesmo “atrás do pano”, ajudaram à construção deste cenário...um gigante obrigado.

Aos amigos especiais Sara e Gil.

Aos meus pais, pela grande tarefa da educação. À minha tia, pelo seu papel tão especial e à minha mana por ser única no mundo.

À pequena Bia, por ser a nova estrelinha da minha vida.

E ao Fernando, por tudo. E por acreditar em mim.



## palavras-chave

Qualidade do ar, modelação numérica, diagnóstico, previsão, Portugal Continental

## resumo

A urgente necessidade de diagnosticar e prever a qualidade do ar que respiramos foi o mote para a realização deste trabalho e para o desenvolvimento e aplicação de um sistema de modelação a Portugal Continental. O estudo apresentado focalizou-se nos poluentes mais críticos do panorama nacional actual, nomeadamente ozono ( $O_3$ ) e partículas ( $PM_{10}$ ). O trabalho é iniciado com a caracterização da qualidade do ar, recorrendo aos dados de monitorização existentes. A deficiente cobertura espacial da monitorização da qualidade do ar e a escassez dos dados obtidos em campanhas experimentais, impedem, no entanto, a realização de um diagnóstico real em toda a sua extensão. Para tal, foi aplicado, de 2001 a 2006, um sistema de modelação numérica ao nível nacional. Este sistema integra o modelo meteorológico MM5 e o modelo químico de transporte CHIMERE. O exercício de validação, feito através da comparação entre dados medidos e simulados, permitiu demonstrar que o sistema de modelos tem capacidade para reproduzir correctamente a distribuição espacial e temporal dos poluentes em estudo observada nas várias estações de fundo. A confiança nos resultados do modelo permitiu obter, pela primeira vez, um diagnóstico dos valores de concentração para os vários poluentes gasosos e em fase particulada, para todo o território nacional, e durante um longo período de tempo. Foram identificadas as áreas mais problemáticas em termos de poluição atmosférica e analisado o cumprimento da legislação existente, quer para poluentes gasosos, quer para aerossóis atmosféricos. O ano de 2003 foi estudado separadamente de modo a avaliar o impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar. As emissões libertadas durante a queima de biomassa florestal foram estimadas e integradas no processo de modelação. Os resultados revelam a sua importância na degradação da qualidade do ar ambiente. Esta fase de avaliação incluiu ainda a simulação de cenários de emissões futuros, definidos pelo programa Tectos de Emissão Nacional para 2010.

Relativamente ao objectivo de previsão da qualidade do ar para Portugal, este envolveu a pesquisa dos vários métodos de previsão disponíveis e utilizados actualmente, tendo sido desenvolvido um modelo estatístico para Lisboa e Porto e adaptado o sistema de modelos MM5-CHIMERE para a previsão sobre Portugal Continental. A sua operacionalização foi iniciada em 2004, esteve sob avaliação durante o período experimental 2005-2006, tendo sido divulgada ao público no início de 2007. A avaliação do desempenho do sistema de previsão revelou uma satisfatória taxa de sucesso para as concentrações de  $O_3$  e  $PM_{10}$ . Para a divulgação dos resultados foi desenvolvida uma página de Internet, de forma a permitir a visualização do índice de qualidade do ar previsto.

## keywords

Air quality, numerical modelling, diagnostic, forecast, Portugal

## abstract

The motivation for the present work was the urgent need to diagnose and predict the ambient air quality over Portugal. The study focused on the main critical pollutants affecting the national and European contexts, specifically: ozone ( $O_3$ ) and particulate matter ( $PM_{10}$ ). The characterization of air quality based on existent monitoring data was the initial step of this work. The deficient spatial coverage of the past and present monitoring network, together with the shortage of experimental campaigns data, limit the performance a real and extended air quality evaluation. In this sense, a numerical modelling system was applied to the 2001-2006 period over the mainland Portugal domain. This system integrates the MM5 meteorological model and the CHIMERE chemistry transport model. The validation exercise was performed by comparing observed and modelled data according to quality assurance/quality control procedures. The modelling system was able to reproduce the correct spatial and temporal distribution of pollutants observed at background stations, supporting the use of model results for air quality research and management purposes. The first gaseous and aerosol pollutant concentration maps were obtained for Portugal over a long-term period. The fulfillment of the legislated limit values was analysed and the most stressed areas were identified. The year 2003 was studied separately in order to evaluate the impact of forest fire emissions on air quality. These emissions were estimated and integrated in the numerical modelling system. The results emphasized the importance of the forest fires on the air quality degradation and the subsequent increase of the limit values exceedances of  $O_3$  and  $PM_{10}$ . This evaluation phase also included the simulation of future scenarios defined for 2010 by the National Emission Ceilings Programme. The air quality forecast objective begins with research of the available methods to predict air pollutants concentrations. A statistical model was developed for Lisbon and Porto cities, where a sufficient high-density monitoring network exists. Over Portugal, the MM5-CHIMERE modelling system was adapted for operational use. This real-time application began in 2004 and was tested until 2006 for  $O_3$  and  $PM_{10}$ . The air quality forecast results were made available to the public in early 2007. The operational model performance was evaluated during the experimental period and was successful in predicting the maximum pollutant concentrations. A web page was launched to disseminate information and increase public awareness of the air quality index forecasted.

*All exact science is dominated by the idea of approximation.*  
Bertrand Russell

*The future ain't what it used to be*  
Yogi Berra

# Índice

<b>1. Introdução .....</b>	<b>3</b>
<b>2. A monitorização da qualidade do ar em Portugal .....</b>	<b>11</b>
2.1 Monitorização meteorológica .....	11
2.2 Monitorização da qualidade do ar .....	14
2.3 Análise dos dados de monitorização da qualidade do ar .....	22
2.4 Campanhas experimentais com tubos de difusão .....	28
<b>3. Sistema de modelação da qualidade do ar .....</b>	<b>35</b>
3.1 Estado-da-arte da modelação da qualidade do ar .....	35
3.2 Descrição geral do sistema de modelos seleccionado .....	41
<b>4. Avaliação da qualidade do ar em Portugal .....</b>	<b>69</b>
4.1 Validação do sistema de modelação .....	70
4.2 Avaliação da qualidade do ar em 2001 .....	90
4.3 Análise integrada da qualidade do ar: 2001- 2006 .....	100
4.4 Avaliação do impacto dos Tectos de Emissões Nacionais .....	104
<b>5. Avaliação do impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar .....</b>	<b>111</b>
5.1 O impacto dos incêndios florestais .....	111
5.2 Estimativa das emissões de incêndios florestais - ano 2003 .....	113
5.3 Avaliação dos resultados da modelação - ano 2003 .....	124
<b>6. Previsão da qualidade do ar para Portugal .....</b>	<b>133</b>
6.1 Estado-da-arte da previsão da qualidade do ar .....	133
6.2 Previsão estatística para Lisboa e Porto .....	137
6.3 Sistema de previsão numérica para Portugal .....	148
6.4 Avaliação do sistema numérico de previsão .....	154
6.5 Divulgação da previsão e gestão da qualidade do ar .....	172
<b>7. Conclusões .....</b>	<b>181</b>
<b>8. Referências bibliográficas .....</b>	<b>189</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>A1</b>
Anexo I. Legislação relativa à qualidade do ar .....	A3
Anexo II. Mecanismo químico do modelo CHIMERE: reações e espécies químicas simuladas .....	A5
Anexo III. Inventário de emissões para Portugal .....	A9
Anexo IV. Validação do modelo CHIMERE – aplicação ano 2004 .....	A11
Anexo V. Correlações obtidas na previsão estatística .....	A15
Anexo VI. Validação do modelo MM5 .....	A17

# Index

1.	Introduction .....	1
2.	Air quality monitoring in Portugal.....	9
3.	The air quality modelling system .....	33
4.	Air quality assessment for Portugal.....	65
5.	The impact of forest fire emissions on air quality.....	109
6.	Air quality forecast for Portugal.....	131
7.	Conclusions .....	179
8.	References .....	189
	Annexes .....	A1

# Lista de Figuras

Figura 2.1. Localização das estações meteorológicas (a) existentes em Portugal Continental e (b) seleccionadas para este estudo.....	13
Figura 2.2. Zonas e aglomerações definidas para Portugal Continental. ....	15
Figura 2.3. Localização geográfica e classificação das estações de monitorização de $O_3$ , em funcionamento em 2001, 2003 e 2006, e com eficiência superior a 85%. ....	19
Figura 2.4. Localização geográfica e classificação das estações de monitorização de $PM_{10}$ , em funcionamento em 2001, 2003 e 2006, e com eficiência superior a 85%. ....	19
Figura 2.5. Localização geográfica (em pormenor) das estações de monitorização de $O_3$ localizadas nas áreas urbanas do Porto e Lisboa, existentes em 2006. ....	20
Figura 2.6. Localização geográfica (em pormenor) das estações de monitorização de $PM_{10}$ localizadas nas áreas urbanas do Porto e Lisboa, existentes em 2006. ....	20
Figura 2.7. Localização geográfica das estações seleccionadas para análise temporal da qualidade do ar monitorizada em cada uma das CCDRs. ....	21
Figura 2.8. Evolução diária das médias horárias de $O_3$ e $PM_{10}$ , durante os anos 2001-2006, para as 4 estações seleccionadas. ....	22
Figura 2.9. Evolução do valor médio, máximo e mínimo das médias (diurnas) de $O_3$ para as estações em estudo, entre 2001 e 2006. ....	24
Figura 2.10. Ultrapassagens ao (a) limiar horário de informação e (b) alerta ao público para a protecção da saúde humana ao ozono, durante o período de estudo 2001-2006. ....	25
Figura 2.11. Ultrapassagens ao (a) valor alvo, para 2010, para protecção da saúde humana e (b) evolução do valor de AOT40 para a protecção da vegetação ao ozono, durante o período em estudo (2001-2006). ....	25
Figura 2.12. Evolução do valor médio, máximo e mínimo das médias diárias de $PM_{10}$ para as estações em estudo, entre 2001 e 2006. ....	26
Figura 2.13. Comparação entre a (a) média anual e (b) números de dias com ultrapassagem do valor limite diário de $PM_{10}$ para as várias estações em estudo, entre 2001-2006. ....	27
Figura 2.14. Representação esquemática da malha usada nas campanhas de medição com tubos de difusão, realizadas em 2001 [Ferreira <i>et al.</i> , 2001]. ....	29
Figura 2.15. Concentrações médias de $NO_2$ e $O_3$ obtidas nas campanhas com tubos de difusão realizadas em 2001. ....	30
Figura 3.1. Estrutura da modelação euleriana [Reid <i>et al.</i> , 2007]. ....	37
Figura 3.2. Esquema simplificado da modelação de aerossóis.....	39
Figura 3.3. Esquema do sistema de modelos MM5-CHIMERE seleccionado para este estudo. ....	41
Figura 3.4. Estrutura vertical da grelha do sistema MM5. Exemplo para 15 níveis. As linhas a cheio representam os níveis sigma e a tracejado os níveis "half-sigma" [NCAR, URL1]. ....	43
Figura 3.5. Módulos do sistema de modelação MM5.....	43
Figura 3.6. Domínios de aplicação do modelo MM5 para o caso de estudo de Portugal Continental. ....	47
Figura 3.7. Domínios de aplicação do modelo CHIMERE ao caso de estudo de Portugal Continental. ....	49
Figura 3.8. Princípio do "operator-separador" <i>versus</i> a sua adaptação no modelo CHIMERE. ....	55
Figura 3.9. Grandes fontes emissoras industriais existentes em Portugal. ....	57
Figura 3.10. Emissões de $PM_{10}$ provenientes das (a) autoestradas (metodologia "bottom-up") e (b) restantes estradas urbanas e rurais (metodologia "top-down").....	59

Figura 3.11. Emissões de (a) $\text{NO}_x$ e (b) COVNM provenientes de todas as actividades antropogénicas, com excepção dos transportes rodoviários. ....	59
Figura 3.12. Comparação entre as emissões antropogénicas totais estimadas para 2001, 2002 e 2003. ....	60
Figura 3.13. Comparação entre (a) o total de emissões e (b) as do transporte rodoviário para cada inventário, por espécie poluente. ....	61
Figura 3.14. Distribuição espacial das emissões de $\text{NO}_x$ provenientes do tráfego rodoviário para uma (a) desagregação por concelho e (b) por freguesia. ....	62
Figura 3.15. Comparação entre o Erro Quadrático Médio (EQM) obtido entre as duas simulações, para $\text{O}_3$ e $\text{PM}_{10}$ , considerando a média para os vários tipos de estações de fundo (rural, suburbano e urbano). ....	62
Figura 3.16. Exemplo de conversão das emissões de $\text{PM}_{10}$ dos três inventários para a grelha de resolução $10 \times 10 \text{ km}^2$ usada na simulação do domínio de Portugal Continental. ....	63
Figura 3.17. Desvios verificados (EQM e BIAS) entre os valores observados e modelados ( $\text{O}_3$ e $\text{PM}_{10}$ ) com cada inventário de emissões, considerando a média para os diferentes tipos de estações de fundo. ....	64
Figura 4.1. Comparação entre os máximos diários de $\text{O}_3$ observados e simulados, para diferentes tipos de estações de monitorização e para o período de Verão (Maio-Setembro) de 2001. ....	71
Figura 4.2. Comparação entre os máximos diários de $\text{NO}_2$ observados e simulados para diferentes tipos de estações de monitorização, e para o período de Verão (Maio-Setembro) de 2001. ....	72
Figura 4.3. Comparação entre os perfis diários médios observado e modelado durante o Verão de 2001, para 4 estações com diferente tipologia (Avanca, Ermesinde, Formosa e Lavradio). ....	73
Figura 4.4. Comparação entre os máximos diários de $\text{O}_x$ observados e simulados para diferentes tipos de estações de monitorização, e para o período de Verão (Maio a Setembro) de 2001. ....	74
Figura 4.5. Máximos diários de $\text{O}_3$ , $\text{NO}_2$ e $\text{O}_x$ simulados <i>versus</i> observados, para o período Verão (Maio a Setembro) de 2001. ....	75
Figura 4.6. Comparação entre as concentrações horárias de $\text{PM}_{10}$ , observadas e simuladas pelo modelo, em vários tipos de estações de monitorização, para 2001. ....	76
Figura 4.7. Erro sistemático normalizado (média de todas as estações), para os máximos diários de $\text{O}_3$ , durante o Verão de 2001. ....	80
Figura 4.8. Avaliação estatística (r, EQM e BIAS) do desempenho do sistema de modelos na simulação de $\text{PM}_{10}$ , para as estações de fundo (em cima) e de tráfego (em baixo). ....	83
Figura 4.9. Avaliação estatística (r, BIAS e EQM) do desempenho do sistema de modelos na simulação de $\text{PM}_{10}$ , durante o Verão e o Inverno, e para as estações de fundo. ....	84
Figura 4.10. Mapas de concentração de $\text{NO}_2$ resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 7-21 Maio 2001. ....	88
Figura 4.11. Mapas de concentração de $\text{O}_3$ resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 7-21 Maio 2001. ....	89
Figura 4.12. Mapas de concentração de $\text{O}_3$ resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 21-29 Junho 2001. ....	89
Figura 4.13. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o $\text{SO}_2$ , para 2001. ....	91
Figura 4.14. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o CO, para 2001. ....	92
Figura 4.15. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o $\text{NO}_2$ , para 2001. ....	93
Figura 4.16. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o $\text{O}_3$ , para 2001. ....	94
Figura 4.17. Campos superficiais de concentração de $\text{O}_3$ simulados para os dias em que se verificaram excedências ao limiar de informação ao público ( $180 \mu\text{g m}^{-3}$ ), durante o Verão de 2001. ....	95
Figura 4.18. Resultados do modelo para a (a) 35ª máxima média diária de $\text{PM}_{10}$ e para (b) o número de dias com ultrapassagens do valor limite, para 2001. ....	96
Figura 4.19. Resultados do modelo para as médias anuais de (a) $\text{PM}_{2.5}$ e (b) $\text{PM}_{10}$ , e (c) respectiva fracção, para 2001. ....	97

Figura 4.20. Resultados do modelo para as médias de PM <sub>10</sub> de (a) Verão e (b) Inverno, e (c) respectiva diferença, para o ano de 2001. ....	98
Figura 4.21. Resultados do modelo para a média anual (a) do aerossol orgânico secundário e (b) diferenças relativas obtidas entre o período de Verão e Inverno, para 2001. ....	99
Figura 4.22. Resultados da modelação para a 26ª máxima média móvel octo-horária diária de O <sub>3</sub> , para 2001, 2004 e 2006. ....	101
Figura 4.23. Resultados da modelação para o AOT40, relativo ao O <sub>3</sub> , para 2001, 2004 e 2006. ....	101
Figura 4.24. Resultados da modelação para a 35ª máxima média diária de PM <sub>10</sub> para 2001, 2004 e 2006. ....	102
Figura 4.25. Resultados da modelação para a média anual de PM <sub>10</sub> para 2001, 2004 e 2006. ....	103
Figura 4.26. Comparação das emissões de NO <sub>x</sub> e COVNM, para o ano de referência e para os cenários de emissões, nos vários sectores de actividade. ....	106
Figura 4.27. Resultados de modelação para o valor limite horário de NO <sub>2</sub> para a protecção da saúde humana para 2001 e diferenças entre o ano de base e os cenários baixos de 2005 e 2010. ....	107
Figura 4.28. Resultados de simulação do AOT40, relativo ao ozono, para o ano de referência de 2001 e para os cenários baixos de 2005 e 2010. ....	108
Figura 5.1. Imagem do satélite AQUA obtida em 3 de Agosto de 2003 [NASA, URL10]. ....	112
Figura 5.2. Metodologia de cálculo de emissões de incêndios florestais. ....	113
Figura 5.3. Distribuição espacial dos incêndios florestais de 2003, com área superior a 100 ha [DGRF, 2006]. ....	115
Figura 5.4. Distribuição mensal da área ardida e do número de incêndios florestais ocorridos em 2003, com área superior a 100 ha. ....	116
Figura 5.5. Evolução da área ardida durante o mês de Agosto de 2003. ....	116
Figura 5.6. Distribuição espacial da área ardida e duração dos incêndios florestais, ocorridos em 2003, com área superior a 100 ha. ....	117
Figura 5.7. Esquema da metodologia de cálculo das emissões dos incêndios florestais. ....	121
Figura 5.8. Distribuição espacial das emissões estimadas de PM <sub>10</sub> e CO dos incêndios florestais, com área superior a 100 ha, ocorridos em 2003. ....	122
Figura 5.9. Parâmetros estatísticos (erro quadrático médio, BIAS e factor de correlação) obtidos na validação do sistema de modelos, para cada estação de monitorização de O <sub>3</sub> . ....	126
Figura 5.10. Parâmetros estatísticos (erro quadrático médio, BIAS e factor de correlação) obtidos na validação do sistema de modelos, para cada estação de monitorização de PM <sub>10</sub> . ....	127
Figura 5.11. Comparação entre o número de ultrapassagens, ao valor limite legislado, observado e simulado (SR e SF), durante Agosto 2003, em cada estação de fundo de O <sub>3</sub> e PM <sub>10</sub> . ....	128
Figura 5.12. Diferenças obtidas ( $\mu\text{g m}^{-3}$ ) entre a simulação com emissões de incêndios florestais e a simulação de referência, para a máxima diária de O <sub>3</sub> , para os dias 1 a 8 Agosto de 2003. ....	129
Figura 5.13. Diferenças obtidas ( $\mu\text{g m}^{-3}$ ) entre a simulação com emissões de incêndios florestais e a simulação de referência, para a média diária de PM <sub>10</sub> , para os dias 1 a 8 Agosto de 2003. ....	130
Figura 6.1. Mapa de localização das estações meteorológicas e de qualidade do ar para as regiões de Lisboa e Porto, e futuras associações consideradas (a tracejado). ....	137
Figura 6.2. Representação gráfica das concentrações de O <sub>3</sub> observadas <i>versus</i> previstas para LH1 e LO3. ....	143
Figura 6.3. Representação gráfica das concentrações de O <sub>3</sub> observadas <i>versus</i> previstas para PH1 e PO1. ....	143
Figura 6.4. Representações gráficas dos valores observados <i>vs</i> previstos para L2 e P1. ....	146
Figura 6.5. Esquema de funcionamento do sistema de modelos da previsão da qualidade do ar. ....	149
Figura 6.6. Comparação entre os valores observados e previstos pelo MM5 para a temperatura, velocidade e direcção do vento. ....	155



Figura 6.7. Comparação entre o perfil diário médio de temperatura observado e previsto para o período de Verão (Abril 06-Setembro 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07), para as estações de Lisboa e Porto. ....	158
Figura 6.8. Comparação entre o perfil diário médio da velocidade do vento observado e previsto para o período de Verão (Abril 06-Set. 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07), para as estações de Lisboa e Porto. ....	159
Figura 6.9. Concordância (%) entre o IQA simulado e o observado para $O_3$ , para os 3 dias previstos, durante o período de Verão 2006 (Maio - Setembro). ....	160
Figura 6.10. Concordância (%) entre o IQA simulado e o observado para $PM_{10}$ , para os 3 dias previstos, durante o período de Verão 2006 (Maio-Setembro).....	161
Figura 6.11. Comparação entre a concordância (%) do IQA para $PM_{10}$ entre o período de Verão e Inverno, para o 1º dia de previsão (Dia+0), e para diferentes tipos de estações. ....	162
Figura 6.12. Comparação entre as concentrações máximas diárias de $O_3$ observadas e simuladas pelo modelo em diferentes estações, durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro). ....	164
Figura 6.13. Razão entre os parâmetros estatísticos obtidos na validação do $O_3$ excluindo e considerando os dias em que ocorreram incêndios florestais. ....	165
Figura 6.14. Comparação entre as concentrações médias diárias de $PM_{10}$ observadas e simuladas em várias estações, durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro). ....	166
Figura 6.15. Comparação entre as concentrações médias diárias de $PM_{10}$ observadas e simuladas em várias estações, durante o período de Inverno de 2007 (Janeiro-Março). ....	167
Figura 6.16. Parâmetros estatísticos para as estações de fundo rural e suburbano que monitorizaram $O_3$ durante o Verão de 2006. ....	168
Figura 6.17. Parâmetros estatísticos calculados para as estações de fundo de $PM_{10}$ , para os três dias de previsão, durante o Verão de 2006 (Junho-Setembro). ....	170
Figura 6.18. Página principal de acesso à previsão da qualidade do ar ( <a href="http://www.dao.ua.pt/gemac/previsao_qar">www.dao.ua.pt/gemac/previsao_qar</a> ). ....	173
Figura 6.19. Página de internet de acesso à informação sobre o índice de qualidade do ar previsto para o $O_3$ e $PM_{10}$ ( <a href="http://www.dao.ua.pt/gemac/previsao_qar/prev.html">www.dao.ua.pt/gemac/previsao_qar/prev.html</a> ).....	174
Figura A.1. Comparação entre o desempenho do modelo MM5 no período de Verão e Inverno, na previsão da temperatura, componente zonal e meridional do vento.....	A17
Figura A.2. Comparação entre os perfis diários de temperatura e velocidade do vento observados e previstos, para o Verão (Abril 06-Setembro 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07). ....	A18

# Lista de Tabelas

Tabela 2.1. Lista das estações de monitorização de O <sub>3</sub> em funcionamento entre 2001-2006.....	17
Tabela 2.2. Lista das estações de monitorização de PM <sub>10</sub> em funcionamento entre 2001-2006.....	18
Tabela 2.3. Lista das estações de monitorização seleccionadas para análise, para cada CCDR.....	21
Tabela 3.1. Parametrizações físicas disponíveis no modelo MM5 [NCAR, URL1]. ....	45
Tabela 3.2. Variáveis de saída do modelo MM5 necessárias para o modelo químico CHIMERE. ....	49
Tabela 3.3. Categorias de uso do solo usadas pelo modelo CHIMERE e correspondência com a GLCF. ....	50
Tabela 4.1. Parâmetros estatísticos estimados para cada estação de monitorização para as espécies NO <sub>2</sub> , O <sub>3</sub> e O <sub>x</sub> , relativos à simulação de 2001.....	78
Tabela 4.2. Contribuição relativa (%) da variância das componentes da série temporal para a variância total existente entre observações e simulações; soma das variâncias e variância da série original. ....	82
Tabela 4.3. Coeficiente de correlação e razão de variâncias (modelado/observado) para as várias componentes da série temporal.....	82
Tabela 4.4. Comparação entre valores de aerossóis (inorgânicos e orgânicos) observados e simulados em Aveiro, para os períodos de Verão e Inverno de 2001. ....	85
Tabela 4.5. Objectivos de qualidade definidos pela legislação para a avaliação da concentração dos poluentes por técnicas de modelação.....	86
Tabela 4.6. Estimativa da incerteza média para todas as estações de monitorização, relativamente a cada um dos parâmetros definidos na legislação (Anexo I). ....	87
Tabela 4.7. Comparação entre as emissões nacionais estimadas para o ano de base 2001 e para os cenários 2005 e 2010 e os tectos de emissão nacional definidos na Directiva PTEN para Portugal. ....	105
Tabela 4.8. Número de excedências ao limiar de informação do ozono (180 µg m <sup>-3</sup> ) e ao valor de AOT40 (18000 µg m <sup>-3</sup> h <sup>-1</sup> ), simulados para 2001, 2005 e 2010. ....	107
Tabela 5.1. Parâmetros do inventário nacional de incêndios florestais [DGRF, 2006]. ....	114
Tabela 5.2. Distribuição da área de povoamentos florestais, por espécie dominante [DGF, 2001]. ....	118
Tabela 5.3. Valores de carga de combustível e eficiência de combustão para diferentes tipos de combustível [PNAC, 2002; EEA, 2006]. ....	119
Tabela 5.4. Factores de emissão médios para a floresta do Sul da Europa [Miranda, 2004]. ....	120
Tabela 5.5. Valores estimados de emissões relativos a uma ocorrência de incêndio florestal registada em 3 de Agosto de 2003. ....	121
Tabela 5.6. Comparação entre as emissões totais dos incêndios florestais de 2003 em Portugal e as restantes emissões antropogénicas. ....	122
Tabela 5.7. Análise estatística do desempenho do modelo na simulação referência (SR) e na simulação com emissões de incêndios florestais (SF), por distrito, para PM <sub>10</sub> e O <sub>3</sub> . ....	125
Tabela 6.1. Variáveis de entrada utilizadas para obtenção das equações de regressão.....	139
Tabela 6.2. Modelos de regressão múltipla obtidos para o O <sub>3</sub> , para Lisboa e Porto.....	140
Tabela 6.3. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste de Lisboa, para O <sub>3</sub> . ....	141
Tabela 6.4. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste do Porto, para O <sub>3</sub> . ....	142
Tabela 6.5. Modelos de regressão múltipla obtidos para as PM <sub>10</sub> , para Lisboa e Porto. ....	144
Tabela 6.6. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste de Lisboa, para PM <sub>10</sub> . ....	145
Tabela 6.7. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste do Porto, para PM <sub>10</sub> . ....	145

Tabela 6.8. Probabilidade de detecção e de falsos alarmes na previsão de $PM_{10}$ .....	146
Tabela 6.9. Erro sistemático médio calculado para cada equação de regressão na previsão para três dias.....	147
Tabela 6.10. Classificação do Índice de Qualidade do Ar proposto pela APA [APA, URL18]. ....	149
Tabela 6.11. “Crontab” usada para automatização do sistema de previsão da qualidade do ar. ....	151
Tabela 6.12. Tempo estimado para a simulação de cada um dos processadores (modelos) que constituem o sistema de previsão.....	153
Tabela 6.13. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da temperatura superficial, durante o período Abril 2006 – Abril 2007.....	156
Tabela 6.14. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da componente zonal do vento (U), durante o período Abril 2006 – Abril 2007.....	156
Tabela 6.15. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da componente meridional do vento (V), durante o período Abril 2006 – Abril 2007. ....	157
Tabela 6.16. Taxa média de sucesso do IQA previsto (%), por tipo de estação e para os 3 de previsão, para $O_3$ (Verão 2006) e para $PM_{10}$ (Abril 2006-Abril 2007). ....	162
Tabela 6.17. Taxa média de sucesso do IQA previsto (%), por aglomeração e para os 3 dias previstos, durante o Verão 2006 (para $O_3$ ) e o período Abril 2006-Abril 2007(para $PM_{10}$ ).....	163
Tabela 6.18. Probabilidade de detecção e falsos alarmes ao limiar de informação ( $180 \mu g m^{-3}$ ) e ao valor alvo para a protecção da saúde humana ( $120 \mu g m^{-3}$ ). ....	169
Tabela 6.19. Taxas de alarmes detectados e falsos alarmes ao valor limite diário de $PM_{10}$ para a protecção da saúde humana ( $50 \mu g m^{-3}$ ), para o período de Verão e Inverno. ....	171
Tabela A.1. Resumo dos valores limites definidos na legislação para os principais poluentes atmosféricos.....	A3
Tabela A.2. Lista das reacções incluídas no mecanismo químico MELCHIOR2 (fase gasosa).....	A5
Tabela A.3. Lista de espécies simuladas pelo modelo CHIMERE.....	A8
Tabela A.4. Inventário de emissões por tipo de actividade e por poluente, para 2001, 2002 e 2003.....	A9
Tabela A.5. Avaliação estatística do desempenho do sistema de modelos relativamente ao $O_3$ , para 2004...	A11
Tabela A.6. Avaliação estatística do desempenho do sistema de modelos relativamente a $PM_{10}$ , para 2004.	A12
Tabela A.7. Estimativa da incerteza de acordo com o parâmetro RPE, relativo à 26ª máxima média octo-horária diária de $O_3$ .....	A13
Tabela A.8. Estimativa da incerteza de acordo com o parâmetro RPE, relativo à média anual de $PM_{10}$ .....	A14
Tabela A9. Correlações parciais entre a concentração máxima diária de $O_3$ e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto.....	A15
Tabela A10. Correlações parciais entre a concentração máxima octo-horária de $O_3$ e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto.....	A16
Tabela A11. Correlações parciais entre a concentração médias diárias de $PM_{10}$ e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto.....	A17

# Lista de abreviaturas e símbolos

## Abreviaturas

Air4EU	Projecto Europeu “Air4EU: Air for Europe”
APA	Agência Portuguesa do Ambiente
AOT40	Valor limite para a protecção dos ecossistemas relativamente ao ozono (Accumulated Ozone dose over a Threshold of 40 ppb)
BIAS	Erro sistemático médio
CAFE	Clean Air For Europe
CCDR	Comissão de Coordenação e Desenvolvimento Regional
CLTRAP	Convenção sobre Poluição Atmosférica Transfronteiriça a Longa Distância
CNGF	Corpo Nacional da Guarda Florestal
CORINAIR	CO-ordinated INformation on the Environment in the European Community
CTM	Modelo Químico de Transporte (Chemical Transport Model)
DGRF	Direcção-Geral dos Recursos Florestais
DL	Decreto-Lei
EEA	Agência Europeia do Ambiente (Environmental European Agency)
EM	Estados-Membro da União Europeia
EMEP	Programa Europeu de Monitorização e Avaliação (European Monitoring and Evaluation Programme)
EQM	Erro Quadrático Médio
GEMAC-UA	Grupo de Emissões, Modelação e Alterações Climáticas – Universidade de Aveiro
GLCF	Global Land Cover Facility
GMT	Generic Mapping Tools
IM	Instituto de Meteorologia
INERPA	Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas
INETI	Instituto Nacional de Engenharia, Tecnologia e Inovação
IQA	Índice de Qualidade do Ar
IST	Instituto Superior Técnico
MT	Margem de Tolerância
NASA	National Aeronautics and Space Administration (United States)
NCAR	National Center for Atmospheric Research (United States)
NCDC	National Climate Data Center (United States)
NCEP	National Centers for Environment Prediction (United States)
NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration (United States)
NUTS	Nomenclatura de Unidades Territoriais (Nomenclature of Territorial Units for Statistics)
PFA	Porcentagem de Falsos Alarmes
PNAC	Programa Nacional para as Alterações Climáticas
PSU/NCAR	Universidade Estatal da Pensilvânia/Centro Nacional para a Investigação da Atmosfera (Pennsylvania State University/National Center for Atmospheric Research), nos Estados Unidos da América
PTEN	Programa de Tectos de Emissão Nacional
RME	Erro relativo máximo (Relative Maximum Error)
RPE	Erro relativo para um dado percentil (Relative Percentil Error)
SPSS	Software estatístico (Statistical Package for the Social Sciences)
SNAP	Selected Nomenclature for Air Pollution
TUC	Tempo Universal Coordenado
UA	Universidade de Aveiro
UE	União Europeia
UL	Universidade de Lisboa
USEPA	United States Environmental Protection Agency
USGS	United States Geological Survey
VL	Valor Limite
WMO	Organização Meteorológica Mundial (World Meteorological Organization)

## Símbolos

$\sigma$	Coordenada vertical sigma
C	Concentração de poluente
ID	Componente intra-diuna de uma série temporal
DI	Componente diurna de uma série temporal
h	Altura camada mistura
HR	Humidade relativa
K	Coeficiente de difusão turbulenta
k	Nível/camada vertical do modelo CHIMERE
L	Comprimento de Obukhov
LT	Componente de longo-termo
O3dA	Concentração de ozono observada no dia anterior
$P_i$	Pressão no nível i
$P_s$	Pressão superficial
PTdA	Concentração de partículas observada no dia anterior
r	Factor de correlação
SY	Componente sinóptica de uma série temporal
t	variável Tempo
Tmax	Temperatura máxima
$u_*$	Velocidade tangencial
U e V	Componente zonal (U) e meridional (V) do vento
Vvento	Velocidade do vento
z	Coordenada vertical
$w_*$	Velocidade de convecção

## Símbolos de elementos e compostos químicos

APINEN	$\alpha$ -pineno
ASOA	Aerossol orgânico secundário antropogénico
•bio	Radicais peroxi produzidos pela reacção entre o $C_5H_8$ e APINEB com OH
•bioH	Radicais peroxi produzidos pela reacção •bio+ $HO_2$ e •bio+•bio
BSOA	Aerossol orgânico secundário biogénico
CARNIT	Nitrato de carbonilo
$CH_4$	Metano
$C_2H_6$	Etano
$NC_4H_{10}$	N-butano
$C_2H_4$	Eteno
$C_3H_6$	Propeno
$C_5H_8$	Isopreno
$C_6H_6$	Benzeno
$CH_3CHO$	Acetaldeído
$CH_3COE$	Metil-etil cetona
$CH_3COY$	Dimetil glyoxal
$CH_3O_2$	Radical metil-peroxi
$CH_3COO$	Radical acetil-peroxi
$CH_3O_2H$	Hidroperóxido de metilo
CO	Monóxido de carbono
$CO_2$	Dióxido de carbono
COV	Compostos orgânicos voláteis
COSV	Compostos orgânicos semi-voláteis
COVNM	Compostos orgânicos voláteis não metano
EC	Carbono elementar
HCHO	Formaldeído
$H_2O$	Água
$H_2O_2$	Peróxido de hidrogénio
$H_2SO_4$	Ácido sulfúrico
$HNO_3$	Ácido nítrico
HO•	Radical hidróxilo

HO <sub>2</sub> •	Radical hidroperóxilo
HONO	Ácido nitroso
ISNI	Nitrato insaturado resultado da degradação do isopreno
GLYOX	Glyoxal
MEMALD	Dicarbonilos insaturados
MGLYOX	Metil glyoxal
MVK	Metil vinil cetona
NH <sub>3</sub>	Amónia ou amoníaco
N <sub>2</sub> O	Óxido nitroso
N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	Pentóxido de azoto
NO	Óxido de azoto
NO <sub>2</sub>	Dióxido de azoto
NO <sub>3</sub> •	Radical trióxido de azoto
NO <sub>x</sub>	Óxidos de azoto
O <sub>2</sub>	Oxigénio molecular
O <sub>3</sub>	Ozono
O <sub>x</sub>	Soma de O <sub>3</sub> e NO <sub>2</sub>
OC	Carbono orgânico
OXYL	O-xileno
RO <sub>2</sub>	Radicais peroxi resultantes do ataque do OH a hidrocarbonetos
ROOH	Peróxidos orgânicos resultantes da reacção •RO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>
SO <sub>2</sub>	Dióxido de enxofre
SOA	Aerossol orgânico secundário (Secondary Organic Aerosol)
PAH	Hidrocarbonetos poliaromáticos
PAN	Peroxiacetil nitrato
Pb	Chumbo
PM <sub>10</sub>	Partículas com diâmetro aerodinâmico inferior a 10 µm
PM <sub>2,5</sub>	Partículas com diâmetro aerodinâmico inferior a 2,5 µm
PPA	Ácido peroxiacetilico
PPM	Matéria particulada primária



# Chapter 1.

## Introduction

Air quality is one of the areas in which Europe has been most active in recent years. In 1996, the Environment Council adopted the Framework Directive 96/62/EC (FWD) on ambient air quality assessment and management, which covers the revision of previously existing legislation, introduces new air quality standards, and defines an overall strategy in the setting of long-term air quality objectives. In terms of ambient air quality assessment, the FWD also introduces new guidelines, identifying modelling as an air quality management and prediction tool and outlines that ambient air quality shall be assessed by a combination of measurements and modelling techniques to provide an adequate level of information on ambient air quality with respect to the relevant pollutants [DGA-CE, 2000]. In Portugal, the measured data identified ozone ( $O_3$ ) and particulate matter ( $PM_{10}$ ) as the most critical pollutants, with concentrations exceeding the imposed limit values [IA, 2005a]. However, measured concentrations available at given monitoring sites do not sufficiently describe the spatial distribution of air pollutants over wide areas, which is a crucial factor in evaluating the impact of air pollution on human health and natural ecosystems.

Modelling systems can represent suitable tools for these purposes by allowing the study of air quality with an adequate spatial detail and the verification of the fulfillment of the limit targets and threshold values imposed by the EC directives. Recent work [Hogrefe *et al.*, 2001] emphasizes the importance of policy analysis on a “climatological” basis rather than focusing on a single critical episode, allowing better evaluation of model performances and quantifying policy effects with respect to long-term air quality standards. Several ozone modelling studies have been previously performed for mesoscale domains in Portugal, but only during some specific and episode days [e.g., Borrego *et al.*, 2000; Barros *et al.*, 2003]. Large-scale simulations including Portugal have also been performed, but with a coarse grid resolution and considering only gas pollutants [Coutinho and Borrego, 1991].

Air quality modelling techniques are also helpful tools in evaluating the efficiency of appropriate emission reduction strategies. It is particularly important to verify the fulfillment of the air quality limit



values for 2010 considering the National Emission Ceiling Scenarios, defined in 2001 at the Community level in order to limit the negative environmental impacts of acidification, eutrophication and ground-level ozone. The impact of forest fire emissions on air quality is another relevant research area that could be achieved using deterministic air pollution models [Hodzic *et al.*, 2007].

Air quality forecasting is also part of the requirements of the new Air Quality Framework Directive and is a key issue of the CAFE Programme. Furthermore, air quality forecasting is both a challenge and a scientific problem, which has recently emerged as a major priority in many urbanized and industrialized countries due to the increasing consciousness of the effect on health and environment caused by airborne pollutants emissions. An obvious goal of reliable air quality forecasts is that the population exposure can be more efficiently controlled and protected by means of information and real-time emission abatement measures. Forecasting tools used operationally for air quality can be statistical models, based on relations between a set of meteorological predictors and concentration values at different monitoring sites and using this information in a variety of mathematical models such as regression methods, time series filtering, cluster analysis or artificial neural networks [USEPA, 1999]. These probability approaches proved to be very efficient in many cities [e.g. Simpson and Layton, 1983; Gardner and Dorling, 1998]. However, statistical forecasting presents several limitations including the lack of diagnosis capabilities, map representation and the requirement of large stationary training data sets for tuning the model's coefficients, which is a limiting constraint for the specific case of Portugal. Furthermore, the source of pollution cannot be identified by sensitivity experiments, which is a major drawback when concrete actions are to be taken in real time. In contrast, models based on physical equations (called "deterministic models"), driven by the chemistry and the transport of pollutants, require numerous accurate input data (emissions, meteorology, land cover), which are difficult to collect in real time. Also, fine-tuning of physical model parameters and validation of the model are long processes, due to the large computer time required. These latter problems have become less significant with time, due to increases in computer capabilities and improvements in the databases required for the deterministic approach of forecasting.

The present work intends to develop and apply a modelling system for long-term evaluation and real-time air quality forecasting for mainland Portugal, considering both gaseous and aerosol pollutants. The thesis is organized as follows: Chapter 2 includes an air quality assessment over Portugal based on monitoring data. Chapter 3 is devoted to a brief and general description of the modelling system and the emission inventory applied [Monteiro *et al.*, 2007a]. Chapter 4 presents the model validation [Monteiro *et al.*, 2005a; Monteiro *et al.*, 2007d] and the air quality assessment results over mainland Portugal [Monteiro *et al.*, 2007b]. Chapter 5 contains the analysis of the impact on air quality of the forest fire emissions on the summer 2003 [Miranda *et al.*, 2007] and Chapter 6 describes the operational forecasting system [Monteiro *et al.*, 2005b]. Conclusions are presented in Chapter 7.

# Capítulo I

## 1. Introdução

A política de protecção do ambiente e dos recursos naturais da União Europeia (UE) tem vindo a adquirir uma importância crescente, desde a década de 80, devido ao facto de estarem ainda longe de ser controladas as ameaças de danos ambientais e o empobrecimento dos recursos naturais. Felizmente, as populações estão cada vez mais sensibilizadas para os perigos ocultos nesta matéria e têm exigido progressivamente uma acção mais firme de protecção do ambiente a nível nacional e, em particular, europeu [DGA-CE, 2000].

Neste contexto ambiental, a qualidade do ar é um dos temas alvo de uma preocupação especial. Trata-se igualmente de um dos domínios em que a Europa se tem mostrado mais activa nos últimos anos, tendo a Comissão Europeia procurado desenvolver uma estratégia global e estando os Estados-Membros obrigados a transpor e a aplicar novas directivas que fixam objectivos de qualidade a curto e longo prazo. A pedra basilar desta nova estratégia é a Directiva 1996/96/CE, de 27 de Setembro, designada por “Directiva-Quadro”. Esta directiva está actualmente em fase de revisão [COM(2005)447], e define os princípios básicos da estratégia da UE relativamente à qualidade do ar, visando harmonizar os procedimentos de avaliação, previsão e informação ao público e assim preservar/melhorar a qualidade do ar ambiente. Em Portugal este documento foi transposto para a ordem jurídica interna através do Decreto-Lei nº 276/99, de 23 de Julho, onde se definem as linhas de orientação da política nacional de gestão da qualidade do ar ambiente, com exigências estritas de monitorização e previsão da concentração de determinados poluentes, bem como o dever de preparar planos de acção para resolver situações de má qualidade do ar a curto e longo prazo.

A concretização dos princípios e disposições definidos na Directiva-Quadro é estabelecida pelas designadas “Directivas-Filhas”, que têm por fim a regulamentação de cada poluente, através da fixação dos valores normativos (valores limite) e da definição de técnicas de medição e controlo desses poluentes. Neste momento existem três Directivas-filhas aprovadas pelo Parlamento Europeu

e já transpostas para o direito interno por dois Decretos-Lei: um relativo aos valores limite para o dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub>), dióxido de azoto (NO<sub>2</sub>), partículas em suspensão com diâmetro aerodinâmico equivalente inferior a 10 µm (PM<sub>10</sub>), chumbo (Pb), monóxido de carbono (CO) e benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) (Decreto-Lei nº 111/2002 de 16 Abril) e outro, mais recente, referente ao ozono (Decreto-Lei nº 320/2003 de 20 Dezembro).

A referida Directiva-Quadro (e consequentemente o DL nº 276/99) estabelece a obrigatoriedade dos Estados-Membros efectuarem a avaliação e gestão da qualidade do ar em todas as zonas e aglomerações [DGA, 2001], para os poluentes atrás referidos, e realizarem Planos e Programas para as que excederem os limites estabelecidos. Por outro lado, define ainda a obrigatoriedade de informar e assegurar a divulgação da qualidade do ar ao público e organizações relevantes, sugerindo a previsão em tempo real como uma ferramenta de controlo e gestão da qualidade do ar que possibilita o alerta das populações, em termos de saúde pública, e a implementação de planos de acção imediata. As ferramentas de avaliação e previsão da qualidade do ar, reconhecidas e consignadas na Directiva-Quadro, incluem a inventariação de fontes e suas emissões, a monitorização e a modelação da dispersão atmosférica [Borrego *et al.*, 2002a].

Actualmente, devido aos custos elevados de investimento e operação envolvidos, os dados de monitorização recolhidos são limitados, quer geograficamente, quer no que se refere aos poluentes medidos, proporcionando uma visão restrita da qualidade do ar. As estações de monitorização estavam concentradas, até ao ano de 2003, numa fracção superior a 65%, nas duas áreas metropolitanas de Lisboa e Porto, tendo esta fracção diminuído para 50% nos últimos 2 anos. De qualquer modo, a actual monitorização, segundo a qual as partículas em suspensão (PM) e o ozono (O<sub>3</sub>) são identificados como os poluentes mais críticos em termos de exposição humana [IA, 2005a], não é suficiente para cumprir os requisitos impostos pela legislação vigente, sendo vulgar o recurso à realização de campanhas experimentais temporárias para completar a medição exigida [Ferreira *et al.*, 2001; 2002]. Para além destas, existem ainda campanhas experimentais episódicas cujo objectivo principal é aperfeiçoar os conhecimentos científicos dos processos atmosféricos numa determinada região e/ou numa dada altura do ano [Monteiro, 2002; Oliveira *et al.*, 2007]. De facto, para além de publicações científicas baseadas nos resultados destas campanhas episódicas, os trabalhos referentes ao exercício de diagnóstico e avaliação da qualidade do ar ao nível nacional restringiam-se, até ao momento, aos relatórios anuais dos dados medidos nas estações automáticas elaborados por cada uma das Comissões de Coordenação e Desenvolvimento Regional (CCDR), e ao mapeamento, por interpolação, dos dados obtidos nas campanhas. Estes dados são, no entanto, confinados no tempo, no tipo de poluentes analisados e no método de medição, o qual permite apenas obter valores médios ao longo do período de monitorização. A necessidade de caracterizar adequadamente o restante território nacional, para além de um conhecimento mais espciado da composição química da atmosfera, é evidente. Por outro lado, a necessidade de previsão dos níveis de qualidade do ar em Portugal não poderá ser resolvida com

base na monitorização existente, dado que ficaria limitada aos grandes centros urbanos de Lisboa e Porto, únicos locais com uma rede de medição suficientemente densa e com algum historial de base de dados indispensável a qualquer método estatístico de previsão [Veloso *et al.*, 2003; USEPA, 1999; Marques *et al.*, 2007].

Neste contexto, a modelação constitui uma ferramenta essencial, uma vez que permite a estimativa e o prognóstico dos níveis de poluentes na atmosfera (cobrindo inclusivamente áreas não monitorizadas), para além da análise dos impactos associados a novas actividades emissoras e a avaliação da eficácia de medidas mitigadoras da poluição atmosférica. Esta ideia vai ao encontro da estratégia delineada pela política comunitária relativa à qualidade do ar, consubstanciada na criação do programa “Clean Air for Europe” (CAFE), o qual propõe a modelação como meio de avaliação e previsão da qualidade do ar, tanto ao nível regional como local [COM(2001)245]. A modelação numérica da qualidade do ar integra e processa os dados meteorológicos, as emissões dos poluentes e a informação química necessária para estimar o estado da atmosfera num determinado período de tempo (passado, presente ou futuro). Desde os anos 70 que a modelação dos processos de transporte e dispersão de poluentes na atmosfera tem vindo a ser efectuada por métodos sucessivamente mais complexos e realistas [Moussiopoulou, 1996; Reid *et al.*, 2007]. Este esforço traduziu-se, não só na necessidade de utilização de meios informáticos cada vez mais poderosos como também num aumento significativo da quantidade e detalhe dos dados de entrada e da informação necessária ao estabelecimento das condições iniciais e de fronteira. Ao nível nacional, os trabalhos de modelação da qualidade do ar constituíram, até ao momento, simulações limitadas, quer no tempo, quer no espaço, e quer ao nível dos poluentes considerados. Os estudos realizados compreendiam apenas, até muito recentemente, a simulação de períodos de tempo máximos de alguns dias e eram geralmente aplicados a poluentes fotoquímicos como o  $O_3$ , à escala regional, e a poluentes não-reactivos como o CO, à escala local [Barros *et al.*, 2003; Borrego *et al.*, 2002b; Borrego *et al.*, 2003b; Ferreira *et al.*, 2004; Borrego *et al.*, 2006a]. A simulação numérica de longo prazo e da química dos aerossóis são aspectos com recente desenvolvimento científico em Portugal. A decisão política deve ser, contudo, baseada numa base climatológica, em vez de num episódio crítico em particular [Hogrefe *et al.*, 2001], permitindo também uma validação mais correcta do desempenho dos modelos, para além da avaliação da qualidade do ar no que respeita aos objectivos de longo-termo.

O diagnóstico da poluição atmosférica, aliado à sua modelação, deve ser abordado a vários níveis dependendo das dimensões da área de interesse [Moussiopoulou, 1996]. À escala global, os processos dinâmicos controlam a físico-química da atmosfera. À escala local, a diversidade e heterogeneidade das fontes poluentes impõem uma química mais elaborada e reactiva. À escala regional ocorre o transporte e a transformação dos poluentes atmosféricos fortemente determinados pelas condições atmosféricas, onde as circulações de mesoscala, como as brisas marítimas, têm um papel primordial nos padrões de dispersão nas zonas costeiras, já diversas vezes demonstrado no

passado para o caso de Portugal [Coutinho e Borrego, 1991; Borrego, 1996; Barros, 1999; Monteiro, 2002; Barros *et al.*, 2003]. Deste modo, uma estimativa precisa da qualidade do ar ao nível nacional exige um conhecimento detalhado dos processos físicos e químicos de transporte, dispersão e formação dos poluentes atmosféricos, para além da distribuição e intensidade de todas as fontes poluentes, sendo a escala regional a mais apropriada para a gestão da qualidade do ar.

Esta avaliação, aplicada ao caso específico de Portugal, é também particularmente importante para estimar o impacto de cenários de emissões na qualidade do ar resultante, como é o caso das emissões provenientes dos incêndios florestais ou dos cenários futuros estabelecidos por cada Estado-Membro no âmbito do Programa Nacional de Tectos de Emissões (PTEN) para 2010, de modo a limitar e reduzir os efeitos ambientais negativos da acidificação, eutrofização e do ozono troposférico.

O exemplo das emissões provenientes dos incêndios florestais é especialmente crítico no panorama nacional, onde a área ardida nos últimos 4 anos superou em larga escala a média registada nas últimas décadas, tendo sido responsável pela destruição de 9% do total da floresta portuguesa [EC, 2004]. A queima de biomassa florestal implica a emissão de vários poluentes (como partículas, dióxido e monóxido de carbono, compostos orgânicos voláteis, óxidos de azoto, entre outros), que interferem em diversos processos na atmosfera e cujos efeitos se manifestam a várias escalas [Hodzic *et al.*, 2007]. Estes efeitos vão desde os episódios locais de poluição atmosférica [Miranda, 2004], passando pelos elevados níveis de ozono verificados a algumas distâncias das fontes de emissão [Monteiro *et al.*, 2005a], até ao contributo para as alterações climáticas [Miranda *et al.*, 1994; Carvalho, 2002]. O ano de 2003 constitui um caso de estudo ideal para avaliar o impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar.

Em relação ao desenvolvimento e implementação de um programa de previsão da qualidade do ar em tempo real, trata-se de um desafio de ordem científica que emergiu recentemente como uma prioridade ao nível social. As vantagens de uma previsão consistente são óbvias: a exposição da população à poluição atmosférica pode ser mais eficientemente controlada ou mesmo evitada através de planos de acção e medidas mitigadoras de emissões em tempo real.

São diversos os métodos descritos na bibliografia e utilizados na prática, variando no tipo de abordagem (estatística ou numéricos), no tipo de complexidade/desenvolvimento e no esforço e tempo computacional requeridos. Os métodos estatísticos baseiam-se na relação entre as variáveis meteorológicas e as concentrações de poluentes, usando para tal uma variedade de métodos matemáticos como regressão linear, análise de conjuntos ou redes neuronais [USEPA, 1999]. Esta abordagem probabilística provou ser eficiente em várias cidades [Simpson e Layton, 1983; Gardner e Dorling, 1998], apresentando, no entanto, várias limitações como a falta da capacidade de diagnóstico e compreensão da origem/causa do problema, para além de requerer uma extensa base de dados, quer ao nível meteorológico, quer de qualidade do ar, aspecto particularmente crítico no

caso específico de Portugal. Os modelos numéricos baseiam-se, pelo contrário, nas equações físicas e reacções químicas que descrevem os processos de transformação, transporte e dispersão que ocorrem na atmosfera. A elevada quantidade de dados de entrada necessários tem sido contrabalançada com o aumento das capacidades computacionais e redução do esforço numérico exigido. Entre todos, são estes métodos que apresentam, de um modo geral, maior exactidão e precisão nos valores estimados [USEPA, 1999; Baklanov, 2006].

Hoje em dia, paralelamente à previsão meteorológica, existe já a previsão operacional da qualidade do ar numa série de países, entre eles os Estados Unidos [Eder *et al.*, 2006], Reino Unido [Manning, 2001], França [Vautard *et al.*, 2001], Espanha [Jiménez *et al.*, 2006] e Alemanha [Jakobs *et al.*, 2002]. Esta previsão é usualmente realizada recorrendo a um Índice de Qualidade do Ar, que permite uniformizar o fornecimento da informação ao público sobre o estado da qualidade do ar e os efeitos na saúde humana que lhe estão associados [USEPA, 2000].

O trabalho apresentado teve como principais objectivos o desenvolvimento de um método/sistema de avaliação e previsão da qualidade do ar para Portugal que possibilitasse, por um lado, efectuar um estudo detalhado sobre a poluição atmosférica, ao nível dos poluentes regulamentados e identificados como mais críticos, e que constituísse, por outro lado, uma ferramenta de apoio à gestão da qualidade do ar, quer ao nível local, quer regional. Para além do desenvolvimento e criação de um serviço público de previsão operacional da qualidade do ar, trata-se de um trabalho com carácter inovador em Portugal, nomeadamente no que diz respeito à avaliação de longo prazo dos principais poluentes, tanto fotoquímicos, como aerossóis, identificando as áreas mais problemáticas em termos de poluição atmosférica e analisando o cumprimento da legislação nacional/europeia vigente ou em fase de proposta. Os resultados obtidos possibilitam ainda diagnosticar e prever a natureza dos episódios de poluição atmosférica existentes em Portugal, podendo assim servir como base para a elaboração de "Planos e Programas" ou planos de acção de curto prazo para as zonas e aglomerações onde as concentrações de poluentes excedam, ou estejam em risco de exceder, os valores fixados nas normas.

O trabalho desenvolvido encontra-se descrito nos próximos 6 capítulos e foi sendo publicado ao longo dos 10 artigos referidos. No capítulo dois realiza-se o diagnóstico da qualidade do ar em Portugal Continental com base na sua medição. Para tal, caracterizam-se e analisam-se os dados observados nas estações das redes regionais de monitorização da qualidade do ar. A escassez e restrição geográfica dos dados medidos justificam a escolha e aplicação de um modelo numérico como ferramenta base para este trabalho.

No terceiro capítulo apresenta-se a revisão do estado actual do conhecimento relativamente à modelação da qualidade do ar e descreve-se, em detalhe, o sistema de modelação seleccionado, assim como a sua aplicação no presente estudo. É ainda descrito em detalhe o inventário de

emissões usado e feita a sua avaliação por intercomparação com outros inventários [Monteiro *et al.*, 2007a].

No quarto capítulo é feita a avaliação da qualidade do ar ao nível nacional [Monteiro *et al.*, 2007b] com base nos resultados da modelação, para os principais poluentes gasosos [Monteiro *et al.*, 2005a] e particulados [Monteiro *et al.*, 2007d], para além da validação do desempenho do modelo, realizada de acordo com procedimentos de garantia e controlo da qualidade [Borrego *et al.*, 2007]. É ainda avaliado o impacto na qualidade do ar dos cenários definidos pelo Programa Nacional de Tectos de Emissões para o ano de 2010 [Miranda *et al.*, 2006].

No capítulo cinco estuda-se o efeito das emissões dos incêndios florestais na qualidade do ar ambiente, tendo como caso de estudo o Verão de 2003, particularmente afectado por este fenómeno de destruição da floresta portuguesa. Este impacto foi avaliado através da integração da estimativa das emissões libertadas nestes incêndios florestais no processo de modelação da qualidade do ar [Miranda *et al.*, 2007].

O trabalho relativo à operacionalização do sistema de modelação para a previsão da qualidade do ar em tempo real, para Portugal, é descrito no capítulo seis, juntamente com a avaliação do seu desempenho ao longo dos dois anos de funcionamento em fase experimental [Monteiro *et al.*, 2005b; Monteiro *et al.*, 2007c]. Para além disso, é também apresentado um modelo estatístico desenvolvido para a previsão da qualidade do ar ao nível dos dois principais centros urbanos: Lisboa e Porto [Velo *et al.*, 2004].

As conclusões são apresentadas no capítulo sete.

## Chapter II.

### Air quality monitoring in Portugal

Air quality in Portugal is usually assessed through measured values, observed at fixed monitoring stations or through data from experimental field campaigns. However, the national monitoring network presents several limitations regarding the number and the spatial distribution of stations. Until 2003, the number of O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> monitoring sites with efficient data acquisition was below 25, of which the majority were concentrated at the two urban centers of Porto (32%) and Lisbon (39%). Notwithstanding the significant increase, that occurred after 2003, in the number (total number of stations > 40) and in the spatial coverage of stations (36% of stations are outside Porto and Lisbon areas), only one background station exists per each inland region.

Experimental campaigns were performed during two weeks of 2001 in an effort to do a preliminary evaluation of the air quality over Portugal [Ferreira *et al.*, 2001]. The evaluation covered the entire mainland Portugal, with sampling diffusive points distribution, within a spatial grid of 20 x 20 km<sup>2</sup> resolution, enabling a broader spatial distribution of NO<sub>2</sub> and O<sub>3</sub> than the distribution of the national air quality network. Although the measured values represent only weekly averaged concentrations, the campaign results indicate high levels of NO<sub>2</sub> at Porto and Lisbon metropolitan areas and concentrations of O<sub>3</sub> greater than 100 µg m<sup>-3</sup> in the northeast and southeast regions of Portugal.

In order to perform an air quality diagnostic over Portugal, based on monitoring data, a group of stations was selected according to their geographic location and data collection efficiency along 2001 to 2006. According to these criteria (one station per region and acquisition efficiency for all the study period), the majority of the monitoring sites were excluded, and only 4 stations were able to be selected, representing north, center, metropolitan Lisbon and south region. Measured data were analysed with respect to the several legislated parameters for O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> species, as well as the trend of maximum, median and minimum concentration values along the study period.



Some conclusions can be drawn for both pollutants: (i) the highest concentrations are found at north and center stations and (ii) the peak concentrations and the record number of exceedances to limit values is registered at the industrial site of Teixugueira (center region). This could reflect a local emission problem, but further investigation of the station representativity would be necessary to exclude the hypothesis of a regional background influence.

With respect to ozone, hourly and octo-average limits were exceeded at almost all the sites. Only accumulated ozone thresholds (AOT40) were below the target limit value. Nevertheless, there is a small trend concerning the increase of the number of exceedances of the limit values during the study period. Conversely,  $PM_{10}$  annual mean concentrations present a notable decrease after 2001, with the exception of the maximum peaks measured at year 2004. These episodes can be justified by the occurrence of the European Football Championship (EURO 2004), which involved the construction of several new stadiums and the influx of thousands of participants, both of which are potential emission sources of PM.

Even knowing that this air quality evaluation was based on a limited number of stations and data, it is evident that there are photochemical and particulate matter air pollution problems over Portugal. Modelling techniques can be complementary and essential tools to analyse this question, allowing air quality evaluation outcomes, in time and space, to be enlarged.

## Capítulo II

### 2. A monitorização da qualidade do ar em Portugal

A qualidade do ar pode ser avaliada por monitorização contínua, com recurso a estações fixas ou a campanhas efectuadas com estações móveis, ou ainda através da utilização de modelos ou metodologias que proporcionem a informação necessária a uma adequada gestão. Em Portugal, a qualidade do ar é conhecida principalmente a partir dos dados recolhidos nas estações de monitorização localizadas, com maior predominância, nas grandes áreas urbanas (áreas de influência de tráfego) ou nas áreas industriais mais relevantes.

Dado que a monitorização meteorológica é essencial para o conhecimento e compreensão da qualidade do ar, este capítulo inicia-se com uma caracterização das estações meteorológicas existentes. Segue-se uma descrição das redes regionais de monitorização da qualidade do ar, sua evolução ao longo dos últimos anos e uma análise por tipo de estação e poluentes medidos.

Sendo o objectivo final deste capítulo efectuar o diagnóstico da qualidade do ar com base na sua monitorização, é apresentada uma análise dos dados de qualidade do ar medidos ao longo do período de estudo 2001-2006, no que respeita aos poluentes identificados como mais críticos no panorama nacional, nomeadamente, ozono e partículas.

#### 2.1 Monitorização meteorológica

Os dados meteorológicos constituem parâmetros essenciais para o conhecimento e avaliação do estado do ar ambiente, para além de servirem para a validação dos modelos meteorológicos associados à modelação da qualidade do ar.

Tradicionalmente, as observações meteorológicas são realizadas em dois tipos de estações: as estações sinópticas e as estações climatológicas.

No caso das estações sinópticas, cuja finalidade é a preparação de cartas meteorológicas (sinópticas) imediatas para a previsão do tempo, as observações são efectuadas de 3 em 3 horas, em horas fixas em Tempo Universal Coordenado (TUC).

As estações climatológicas têm como objectivo a caracterização do clima local, e, por isso, as observações referem-se a horas solares fixas (9h e 15h ou 9h e 18h).

No entanto, com a actual instalação de redes de estações automáticas, a maioria das estações meteorológicas permite observações contínuas, com apuramento de valores médios a intervalos relativamente curtos (10 ou 15 minutos), podendo os seus dados ser utilizados tanto para fins sinópticos como climatológicos.

Em relação às variáveis meteorológicas observadas e registadas nestas estações, elas podem ser divididas em dois grupos:

- (i) o primeiro grupo de observações consiste em medidas quantitativas de grandezas, facilmente automatizáveis, como a temperatura e humidade do ar, a pressão, a precipitação, a radiação solar, etc.;
- (ii) o segundo grupo inclui observações semi-quantitativas como a nebulosidade, tipos de nuvens, tipo de precipitação, visibilidade, estado do solo (por exemplo ocorrência de geada ou acumulação de neve), etc.. Estas medidas são difíceis de realizar por intermédio de instrumentos automáticos e continuam a ser efectuadas por observadores meteorológicos.

Para além das estações meteorológicas da Rede Nacional do Instituto de Meteorologia (IM), existem ainda estações meteorológicas pertencentes a entidades privadas, como grandes unidades industriais, bem como outras associadas às Redes Regionais de Monitorização da Qualidade do Ar. Estas estações contêm informação detalhada ao nível do distrito e entidade a que pertencem.

Na Figura 2.1a apresenta-se a localização das 137 estações meteorológicas existentes em Portugal Continental, 115 estações assinaladas a verde e azul pertencentes ao IM e 22 estações assinaladas a preto pertencentes a empresas privadas e geralmente associadas à monitorização da qualidade do ar.

Da análise da Figura 2.1 verifica-se que, para além do elevado número de estações, existe uma distribuição espacial destas estações bastante dispersa, cobrindo quase homogeneamente toda a área de Portugal Continental. Os dados meteorológicos recolhidos em algumas estações da rede nacional (IM) serviram como base de validação do modelo meteorológico usado neste trabalho. A sua obtenção foi feita a partir da página de Internet da “World Meteorological Organization” (WMO), e mais propriamente, a partir do “National Climatic Data Center” (NCDC), que dispõe de dados horários superficiais para todas as estações sinópticas do globo ([www.wmo.int](http://www.wmo.int)).

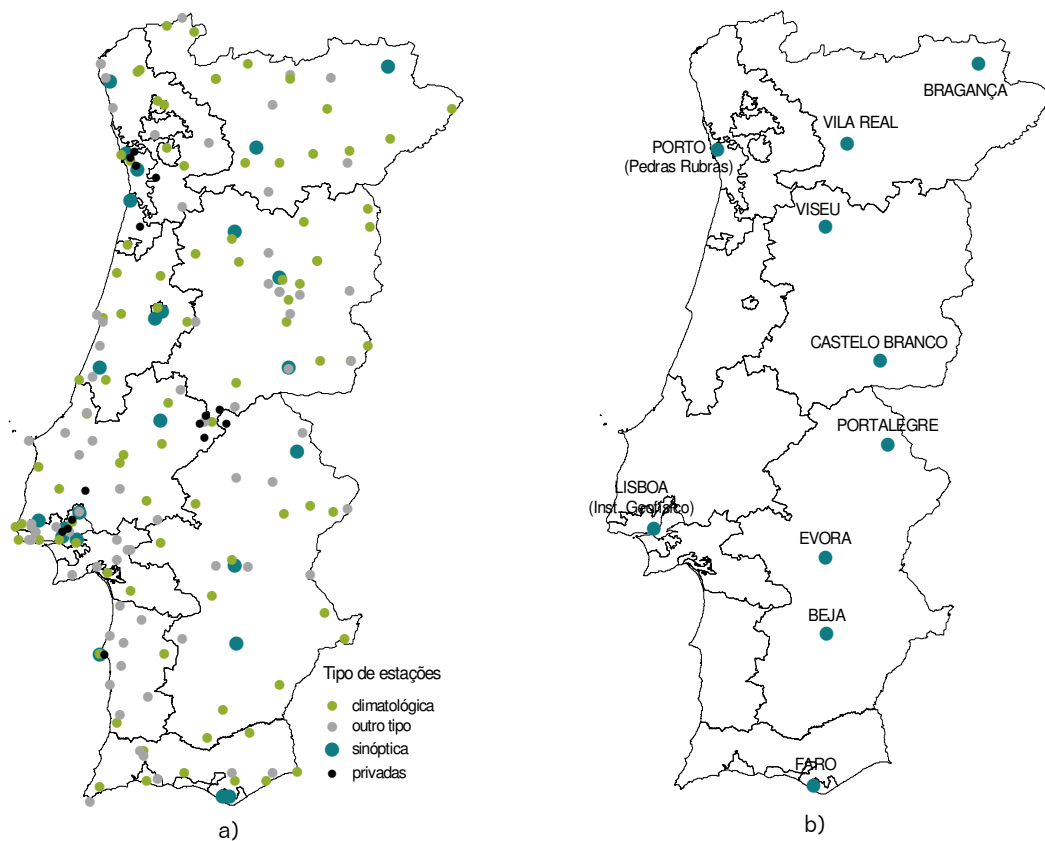


Figura 2.1. Localização das estações meteorológicas (a) existentes em Portugal Continental e (b) seleccionadas para este estudo.

A Figura 2.1b indica as estações com dados disponíveis para Portugal e que foram seleccionadas para o presente estudo. Os dados horários medidos dizem respeito às principais grandezas meteorológicas quantitativas observadas, nomeadamente: temperatura superficial, velocidade e direcção do vento, humidade relativa

Apesar do número ser bastante inferior ao total de estações existentes, a sua distribuição espacial permite a representatividade de cada um dos distritos.

## 2.2 Monitorização da qualidade do ar

Em Portugal, a vigilância da qualidade do ar é feita através das redes regionais de monitorização da qualidade do ar, da responsabilidade de cada CCDR. Estas redes possuem estações localizadas, quer em centros urbanos, quer próximo de zonas sob influência industrial, e são classificadas de acordo com os critérios EUROAIRNET [EEA, 1999], por tipo de influência da estação (tráfego, industrial ou fundo) e por tipo de ambiente ou zona onde se localiza (urbana, suburbana ou rural). Existem ainda estações geridas por entidades privadas, cujos dados são de divulgação facultativa.

Estas redes permitem e têm como objectivos principais:

- Medir e conhecer a concentração dos poluentes no ar;
- Informar sobre a qualidade do ar ambiente através de índices de qualidade do ar;
- Analisar o cumprimento da legislação nacional (valores limite, guia e limiares);
- Observar a evolução da qualidade do ar;
- Suportar a definição de acções para melhoria da qualidade do ar.

A monitorização é efectuada por analisadores de funcionamento contínuo instalados em abrigos, sendo os dados recolhidos remotamente num computador que armazena os valores medidos.

De acordo com a Directiva-Quadro<sup>1</sup> foram definidas zonas e aglomerações para a avaliação e gestão da qualidade do ar ambiente [DGA, 2001]. Entende-se por zonas as áreas geográficas de características homogéneas, em termos de qualidade do ar, ocupação do solo e densidade populacional, e por aglomerações as zonas com um número de habitantes superior a 250 000 ou com uma densidade populacional superior a 500 hab km<sup>-2</sup>. Atendendo à informação sobre a orografia, uso do solo, densidade populacional e a campanhas de monitorização da qualidade do ar, foram delimitadas as seguintes zonas e aglomerações em Portugal (ver Figura 2.2):

- 6 zonas na região Norte, com 3 aglomerações (Porto Litoral, Vale do Ave e Braga);
- 5 zonas na região Centro; com 2 aglomerações (Aveiro/Ílhavo e Coimbra);
- 4 zonas na região de Lisboa e Vale do Tejo, com 3 aglomerações (AML Norte, Sul e Setúbal);
- 2 zonas na região do Alentejo;
- 4 zonas no Algarve, com 3 aglomerações (Portimão/Lagos; Albufeira/Loulé e Faro/Olhão).

---

<sup>1</sup> transposta para a ordem jurídica interna pelo Decreto-Lei nº 276/99, de 23 de Julho

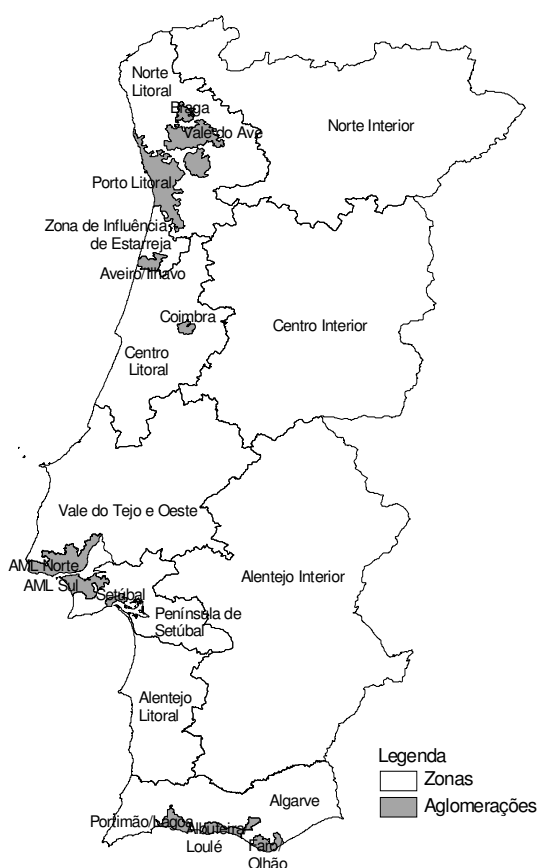


Figura 2.2. Zonas e aglomerações definidas para Portugal Continental.

A Agência Portuguesa do Ambiente (APA) (ex-Instituto do Ambiente), juntamente com as CCDRs, e de acordo com o exigido pela União Europeia, definiram que cada aglomeração deveria possuir uma estação para acompanhamento da poluição originada pelo tráfego automóvel (equipada com analisadores de  $\text{NO}_x$ , CO e  $\text{PM}_{10}$ ) e uma estação do tipo “fundo” que não sofra influência directa de qualquer fonte emissora (equipada obrigatoriamente com analisadores de  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{O}_3$  e  $\text{PM}_{10}$ ).

Tais obrigatoriedades foram responsáveis pelo aumento do número de estações nas várias redes regionais ao longo dos últimos anos, como verificado na Tabela 2.1 e Tabela 2.2, relativas à medição de  $\text{O}_3$  e de  $\text{PM}_{10}$ , respectivamente. Estes serão os dois poluentes em foco neste estudo, uma vez que foram identificados em estudos anteriores como os que apresentam concentrações mais elevadas e preocupantes no panorama nacional [IA, 2004]. No caso do  $\text{O}_3$ , o aumento do número de estações em funcionamento, ocorrido sobretudo até 2004, foi superior a 100% (factor 2,5), tendo sido ainda mais significativo para a medição de  $\text{PM}_{10}$  (factor 3,8). Tal facto deveu-se, principalmente, ao número reduzido de estações de monitorização de partículas existentes até 2001 (apenas 11 com recolha eficiente). É de salientar, no entanto, que apesar deste número inicial baixo, o total de estações de  $\text{PM}_{10}$  ultrapassou, desde o ano 2004, o número das que medem ozono, existindo um total em 2006 de 54 e 49 estações que medem  $\text{PM}_{10}$  e  $\text{O}_3$ , respectivamente.

Em ambas as tabelas distinguem-se as estações que apresentaram uma eficiência na recolha dos dados inferior (a cinzento claro) e superior (a cinzento escuro) a 85%. De acordo com o Anexo X do Decreto-Lei nº 111/2002, a recolha de dados anual de  $PM_{10}$  e, no período de Verão, para  $O_3$  deve ser no mínimo de 90% para que se considere que existe medição em contínuo. No entanto, o “Guidance on the Annexes to Decision 97/101/EC Exchange of Information as revised by Decision 2001/752/EC” [CE, 2002] estabelece que o valor mínimo de captação de dados deve ser recalculado, descontando os dados que se perderam devido às operações de manutenção e calibração habituais dos analisadores. Estima-se que este valor seja, no máximo, 5% resultando num valor mínimo de eficiência de 85% [Borrego *et al.*, 2006b].

Uma análise por tipo de estação leva a concluir que, tal como seria de esperar, as estações de monitorização de ozono são essencialmente de fundo (70%), enquanto que no caso das  $PM_{10}$  esta percentagem desce para cerca de 50% (sendo 40% estações de tráfego). É de salientar, no entanto, que a percentagem relativa às estações de medição de  $O_3$  era bastante menor em 2001 (48%). A reestruturação das redes regionais possibilitou a transferência dos analisadores de ozono de estações de tráfego para as recentes estações de fundo instaladas.

Relativamente à localização geográfica das estações, as Figura 2.3 e 2.4 apresentam a distribuição espacial no território nacional. Estes mapas revelam que, apesar do aumento verificado em número, ainda existe uma elevada densidade junto às duas principais aglomerações de Lisboa e Porto (cerca de 50% do número total de estações), e uma relativamente baixa cobertura do interior português (apenas uma estação de fundo existe em cada zona interior). É notória, no entanto, em 2006 a elevada representatividade de estações na região do Algarve, sendo 3 de fundo e 3 de tráfego. Ainda em relação à distribuição espacial, verifica-se que, em 2006, todas as zonas e aglomerações possuem pelo menos uma estação com carácter de fundo, cumprindo assim os objectivos definidos pela Comissão Europeia.

É possível ver, em maior detalhe, nas Figura 2.5 e 2.6, a rede de estações existentes nas duas principais zonas urbanas. Conclui-se que, tanto para o  $O_3$  (Figura 2.5) como para as  $PM_{10}$  (Figura 2.6), o número de estações é similar em ambas as regiões. Contudo, Lisboa apresenta uma percentagem de estações de fundo significativamente maior (80% para  $O_3$  e 50% para  $PM_{10}$ ). Há ainsa a salientar a elevada densidade de estações no interior de ambas as cidades, comparativamente com as suas áreas limítrofes.

Tabela 2.1. Lista das estações de monitorização de O<sub>3</sub> em funcionamento entre 2001-2006.


Sigla	Nome	Tipo influência	Tipo ambiente	Concelho	2001	2002	2003	2004	2005	2006
AFS	Afonso III	Tráfego	Urbana	Faro						
ALF	Alfragide	Fundo	Urbana	Amadora						
ANT	Antas	Tráfego	Urbana	Porto						
ARC	Arcos	Fundo	Urbana	Setúbal						
AVA	Avanca	Fundo	Rural	Estarreja						
BAG	Baguim	Tráfego	Urbana	Gondomar						
BEA	Beato	Fundo	Urbana	Lisboa						
BOA	Boavista	Tráfego	Urbana	Porto						
CAL	Calendário	Fundo	Suburbana	V.Nova Famalicão						
CAM	Camarinha	Fundo	Urbana	Setúbal						
CER	Cerro	Fundo	Rural	Alcútim						
CHA	Chamusca	Fundo	Rural	Chamusca						
COI-IG	Coimbra-IGEO	Fundo	Urbana	Coimbra						
CUS	Custóias	Industrial	Suburbana	Matosinhos						
ENT	Entrecampos	Tráfego	Urbana	Lisboa						
ERM	Ermesinde	Fundo	Urbana	Valongo						
ERV	Ervedeira	Fundo	Rural	Leiria						
ESC	Escavadeira	Industrial	Urbana	Barreiro						
ESP	Espinho	Tráfego	Urbana	Espinho						
FOR	Formosa	Tráfego	Urbana	Porto						
FRN	Fornelo	Fundo	Rural	Vouzela						
FUN	Fundão	Fundo	Rural	Fundão						
HRT	Horto	Fundo	Suburbana	Braga						
HVE	Hosp. Velho	Tráfego	Urbana	Barreiro						
ILH	Ilhavo	Fundo	Suburbana	Ilhavo						
LAR	Laranjeiro	Fundo	Urbana	Almada						
LAT	C. Lacticínios	Fundo	Urbana	Paços de Ferreira						
LAV	Lavradio	Industrial	Urbana	Barreiro						
LEC	Leça Bailio	Fundo	Suburbana	Matosinhos						
LOU	Loures	Fundo	Urbana	Loures						
MAL	Malpique	Fundo	Urbana	Albufeira						
MARQ	Q <sup>ta</sup> Marquês	Fundo	Urbana	Oeiras						
MAT	Matosinhos	Tráfego	Urbana	Matosinhos						
MCH	Monte Chãos	Industrial	Suburbana	Sines						
MEM	Mem-Martins	Fundo	Urbana	Sintra						
MVE	Monte Velho	Fundo	Rural	Santiago Cacém						
ODI	Odivelas	Tráfego	Urbana	Odivelas						
OLI	Olivais	Fundo	Urbana	Lisboa						
OLO	Lamas Olo	Fundo	Rural	Vila Real						
PER	Perafita	Industrial	Suburbana	Matosinhos						
PONT	Pontal	Fundo	Urbana	Portimão						
PP	Paio Pires	Fundo	Suburbana	Seixal						
REB	Reboleira	Fundo	Urbana	Amadora						
RES	Restelo	Fundo	Urbana	Lisboa						
BRA	R. dos Bragas	Tráfego	Urbana	Porto						
SCA	Santgo Cacém	Industrial	Urbana	Santiago Cacém						
SMIN	S <sup>ra</sup> do Minho	Fundo	Rural	Viana do Castelo						
SON	Sonega	Industrial	Fundo	Santiago Cacém						
STIR	Santo Tirso	Fundo	Urbana	Santo Tirso						
TEI	Teixugueira	Industrial	Suburbana	Estarreja						
TER	Terena	Fundo	Rural	Alandroal						
VCON	Vila Conde	Tráfego	Suburbana	Vila do Conde						
VER	Vermoim	Tráfego	Urbana	Maia						
VNT	V. Nova Telha	Fundo	Suburbana	Maia						
<b>TOTAL estações</b>					<b>24</b>	<b>35</b>	<b>41</b>	<b>48</b>	<b>50</b>	<b>49</b>
<b>TOTAL estações com eficiência &gt; 85%</b>					<b>19</b>	<b>23</b>	<b>32</b>	<b>37</b>	<b>43</b>	<b>44</b>

Eficiência &lt; 85%

Eficiência &gt; 85%



Tabela 2.2. Lista das estações de monitorização de PM<sub>10</sub> em funcionamento entre 2001-2006.

Sigla	Nome	Tipo influência	Tipo ambiente	Concelho	2001	2002	2003	2004	2005	2006
AFS	Afonso III	Tráfego	Urbana	Faro						
ALF	Alfragide	Fundo	Urbana	Amadora						
ANT	Antas	Tráfego	Urbana	Porto						
AVA	Avanca	Fundo	Rural	Estarreja						
AVE	Aveiro	Tráfego	Urbana	Aveiro						
AVL	Av. Liberdade	Tráfego	Urbana	Lisboa						
BOA	Boavista	Tráfego	Urbana	Porto						
CAL	Calendário	Fundo	Suburbana	V.N. Famalicão						
CAM	Camarinha	Fundo	Urbana	Setúbal						
CASC	Cascais	Tráfego	Urbana	Cascais						
CER	Cerro	Fundo	Rural	Alcoutim						
CHA	Chamusca	Fundo	Rural	Chamusca						
CIR	Circular sul	Tráfego	Urbana	Braga						
COI	Coimbra - FM	Tráfego	Urbana	Coimbra						
COI-IG	Coimbra-IGEO	Fundo	Urbana	Coimbra						
CUS	Custóias	Industrial	Suburbana	Matosinhos						
DVN	David Neto	Tráfego	Urbana	Portimão						
ENT	Entrecampos	Tráfego	Urbana	Lisboa						
ERM	Ermesinde	Fundo	Urbana	Valongo						
ERV	Ervedeira	Fundo	Rural	Leiria						
ESC	Escavadeira	Industrial	Urbana	Barreiro						
ESP	Espinho	Tráfego	Urbana	Espinho						
FRN	Fornelo	Fundo	Rural	Vouzela						
FUN	Fundão	Fundo	Rural	Fundão						
GUI	Guimarães	Tráfego	Urbana	Guimarães						
HRT	Horto	Fundo	Suburbana	Braga						
ILH	Ilhavo	Fundo	Suburbana	Ilhavo						
LAR	Laranjeiro	Fundo	Urbana	Almada						
LAT	C. Lacticínios	Fundo	Urbana	Paços Ferreira						
LAV	Lavradio	Industrial	Urbana	Barreiro						
LEC	Leça Bailio	Fundo	Suburbana	Matosinhos						
LOU	Loures	Fundo	Urbana	Loures						
MAL	Malpique	Fundo	Urbana	Albufeira						
MARQ	Q <sup>ta</sup> Marquês	Fundo	Urbana	Oeiras						
MAT	Matosinhos	Tráfego	Urbana	Matosinhos						
MEM	Mem-Martins	Fundo	Urbana	Sintra						
MUN	Município	Tráfego	Urbana	Albufeira						
MVE	Monte Velho	Fundo	Rural	Santiago Cacém						
ODI	Odivelas	Tráfego	Urbana	Odivelas						
OLI	Olivais	Fundo	Urbana	Lisboa						
OLO	Lamas Olo	Fundo	Rural	Vila Real						
PAR	Paredes	Tráfego	Urbana	Paredes						
PER	Perafita	Industrial	Suburbana	Matosinhos						
PONT	Pontal	Fundo	Urbana	Portimão						
QUE	Quebedo	Tráfego	Urbana	Setúbal						
REB	Reboleira	Fundo	Urbana	Amadora						
RES	Restelo	Fundo	Urbana	Lisboa						
SHR	S <sup>ra</sup> Hora	Tráfego	Urbana	Matosinhos						
SMIN	S <sup>ra</sup> do Minho	Fundo	Rural	Viana do Castelo						
STIR	Santo Tirso	Fundo	Urbana	Santo Tirso						
TEI	Teixugueira	Industrial	Suburbana	Estarreja						
TER	Terena	Fundo	Rural	Alandroal						
VCON	Vila Conde	Tráfego	Suburbana	Vila do Conde						
VER	Vermoim	Tráfego	Urbana	Maia						
VNT	V. Nova Telha	Fundo	Suburbana	Maia						
<b>TOTAL estações</b>					<b>19</b>	<b>31</b>	<b>38</b>	<b>50</b>	<b>53</b>	<b>54</b>
<b>TOTAL estações com eficiência &gt; 85%</b>					<b>11</b>	<b>21</b>	<b>29</b>	<b>31</b>	<b>50</b>	<b>50</b>
					 Eficiência < 85%  Eficiência > 85%					

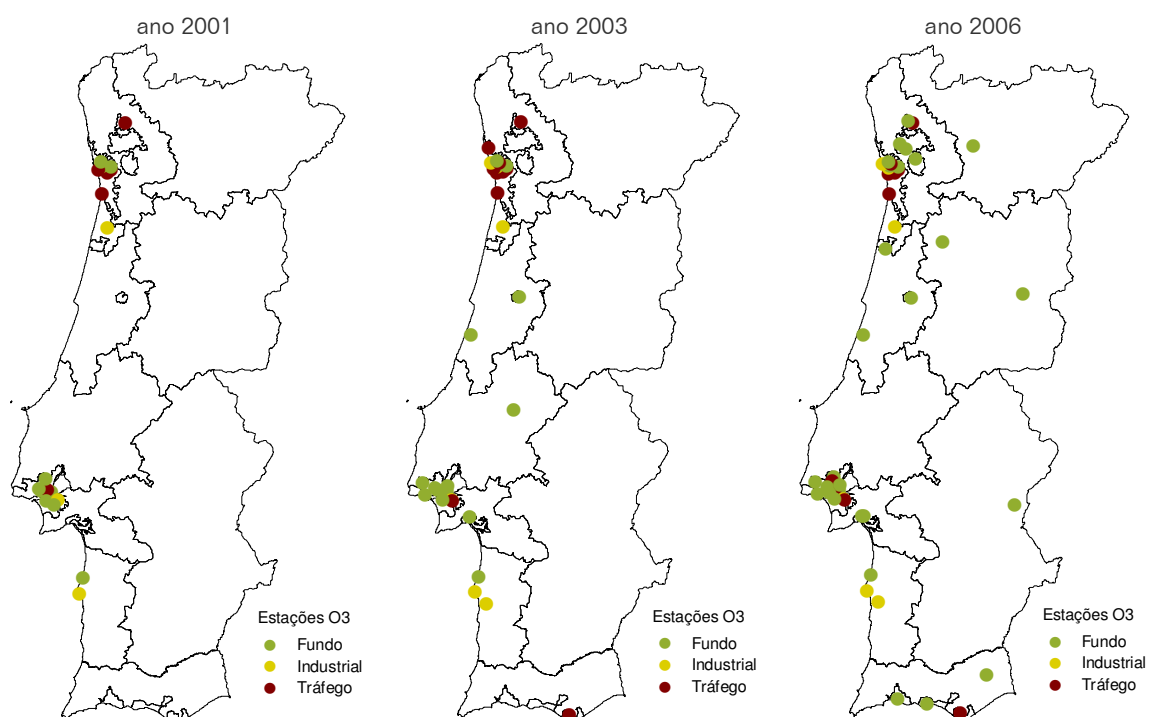


Figura 2.3. Localização geográfica e classificação das estações de monitorização de  $O_3$ , em funcionamento em 2001, 2003 e 2006, e com eficiência superior a 85%.

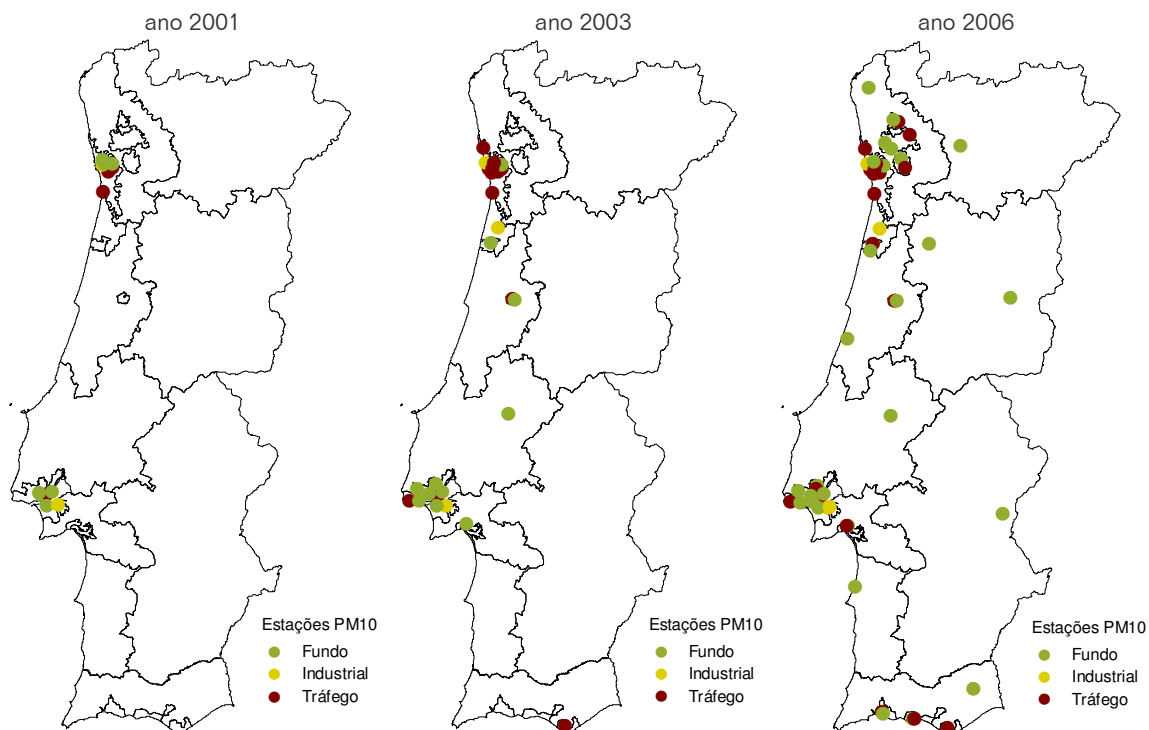


Figura 2.4. Localização geográfica e classificação das estações de monitorização de  $PM_{10}$ , em funcionamento em 2001, 2003 e 2006, e com eficiência superior a 85%.

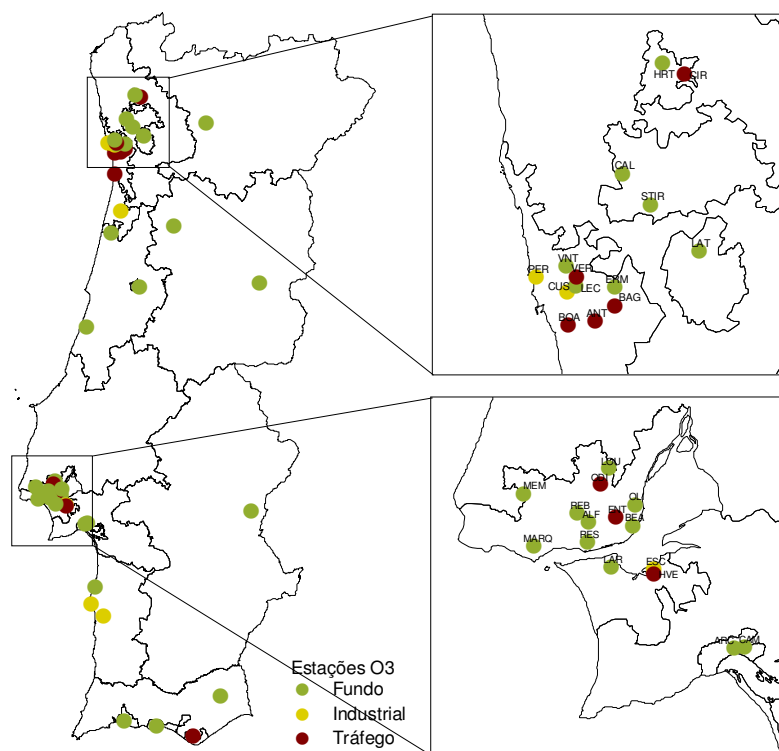


Figura 2.5. Localização geográfica (em pormenor) das estações de monitorização de  $O_3$  localizadas nas áreas urbanas do Porto e Lisboa, existentes em 2006.

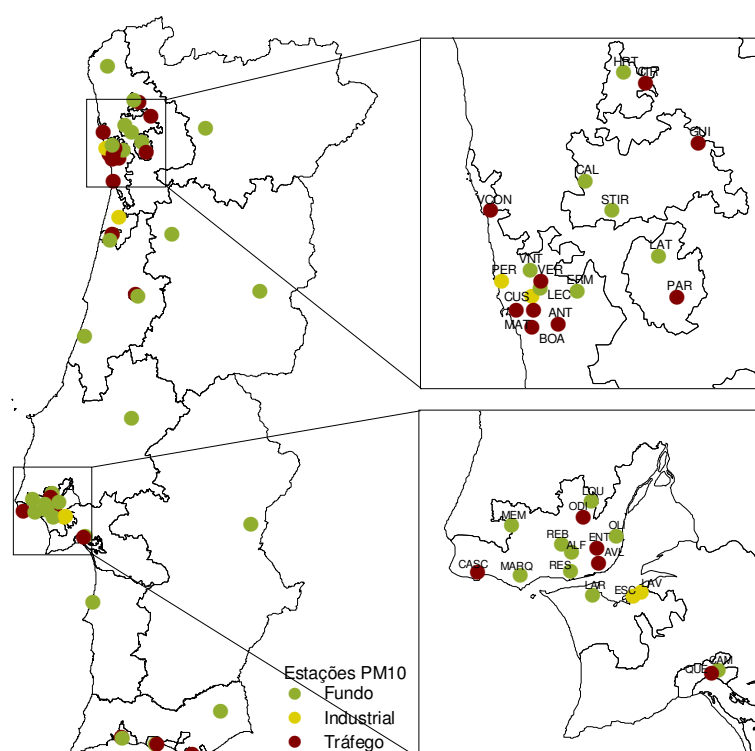


Figura 2.6. Localização geográfica (em pormenor) das estações de monitorização de  $PM_{10}$  localizadas nas áreas urbanas do Porto e Lisboa, existentes em 2006.

Com vista à caracterização e avaliação da qualidade do ar medida ao longo do período temporal 2001-2006 e dada a impossibilidade de se analisar e se apresentar os dados referentes a todas as estações existentes, foi seleccionado um conjunto de estações cujo requisito principal foi o funcionamento eficiente ao longo dos 6 anos de estudo, para cada um dos poluentes. Para além disso, procurou-se eleger uma estação para cada CCDR de forma a obter uma melhor cobertura espacial de todo o país. Tendo em conta estes critérios, o único grupo possível de estações a escolher está descrito na Tabela 2.3 e localizado na Figura 2.7. Não foi possível obter nenhuma estação com recolha eficiente de dados para  $O_3$  e  $PM_{10}$  para a CCDR do Alentejo. Por outro lado, as estações seleccionadas possuem diferente tipo de influência e ambiente, e restringe-se à faixa costeira de Portugal, não havendo nenhum local representativo do interior do país.

Tabela 2.3. Lista das estações de monitorização seleccionadas para análise, para cada CCDR.

Sigla	Nome	Tipo influência	Tipo ambiente	Concelho	CCDR	Poluente
VNT	Vila Nova da Telha	Fundo	Suburbana	Maia	Norte	$O_3$ , $PM_{10}$
TEI	Teixugueira	Industrial	Suburbana	Estarreja	Centro	$O_3$ , $PM_{10}$
LAR	Laranjeiro	Fundo	Urbana	Almada	Lisboa e Vale do Tejo	$O_3$ , $PM_{10}$
AFS	Afonso III	Tráfego	Urbana	Faro	Algarve	$O_3$ , $PM_{10}$

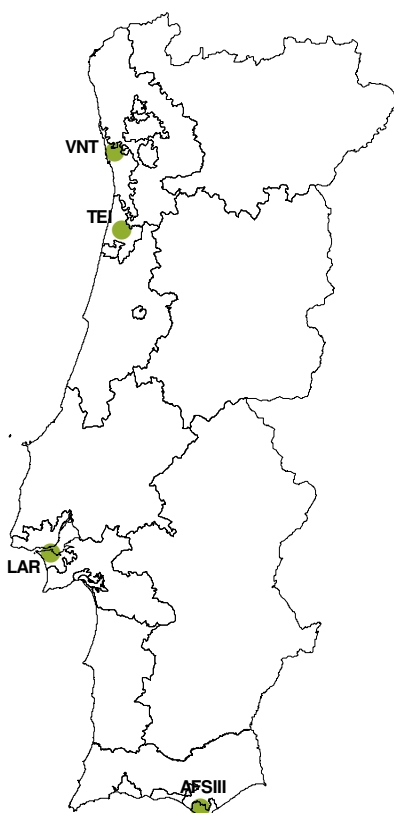


Figura 2.7. Localização geográfica das estações seleccionadas para análise temporal da qualidade do ar monitorizada em cada uma das CCDRs.

## 2.3 Análise dos dados de monitorização da qualidade do ar

De seguida, são analisados os dados medidos nas estações seleccionadas, para os dois poluentes alvo de estudo ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ) durante o período 2001-2006. Esta análise focalizar-se-á na evolução temporal das concentrações observadas e no cumprimento da legislação em vigor para os dois poluentes (resumida no Anexo I). Dado que se tratam de estações de monitorização de carácter distinto (uma estação de tráfego (AFS), uma industrial (TEI) e duas de fundo (VNT e LAR)), são esperados resultados diferentes e é necessário cuidado na sua intercomparação. De modo a conhecer o tipo de comportamento associado a cada estação, inicia-se esta secção com a análise dos perfis diários médios calculados para cada estação.

### 2.3.1 Análise do tipo de estações de monitorização

A análise da variação diária das médias horárias, ao longo dos vários anos em estudo, permite perceber o comportamento de cada estação e avaliar a sua classificação por tipo de influência e de ambiente. Na Figura 2.8 apresentam-se os perfis diários médios obtidos ao longo dos 6 anos em estudo.

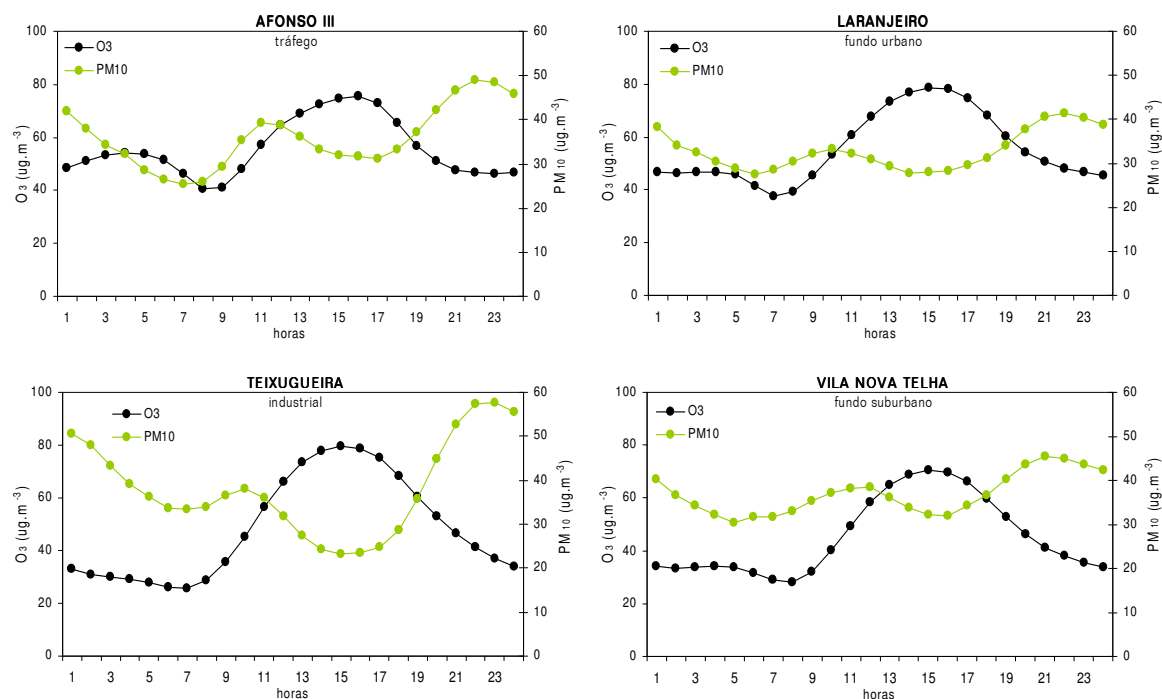


Figura 2.8. Evolução diária das médias horárias de  $O_3$  e  $PM_{10}$ , durante os anos 2001-2006, para as 4 estações seleccionadas.

A estação de Afonso III apresenta um perfil diário de tráfego, de acordo com a sua classificação, com uma variação diária acentuada dos valores de  $PM_{10}$ , onde se identificam dois picos de actividade humana relacionada com uso de transportes: um entre as 8-10h da manhã e outro ao final da tarde, com início às 18h e estendendo-se até às 21h. O perfil de  $O_3$  não reproduz o mesmo tipo de comportamento, pois trata-se de um poluente fotoquímico que é geralmente formado durante o dia e consumido à noite. Verifica-se, contudo, uma variação pouco acentuada da curva (comparativamente às restantes estações) que traduz um potencial consumo deste poluente pelo excesso de  $NO_x$  proveniente do tráfego.

Relativamente à estação do Laranjeiro, classificada como de fundo urbano, observa-se uma variação mais suave dos níveis de  $PM_{10}$  ao longo do dia, revelando um comportamento com maior carácter de fundo, comprovado também pela variação diária dos valores de  $O_3$ .

Por outro lado, a estação de fundo Vila Nova da Telha, apesar de classificada como suburbana, apresenta um perfil diário com maior influência de tráfego, nomeadamente com uma variação diária dos níveis de  $PM_{10}$  mais acentuada e com valores de  $O_3$  mais baixos. Na realidade, esta estação, embora classificada como suburbana, sofre alguma influência de vias de tráfego próximas.

No outro extremo encontra-se a estação de Teixugueira, classificada como industrial, com concentrações de ozono muito elevadas durante o período da tarde, que sugerem a presença do transporte de precursores de  $O_3$  [Monteiro, 2002] e relativamente baixas durante a noite, indiciando um provável consumo de  $O_3$  pelo NO emitido por fontes industriais em operação. Por outro lado, o perfil diário de  $PM_{10}$  revela a presença de outras fontes emissoras de partículas, para além do tráfego, responsáveis pelos elevados valores registados durante o período nocturno. Os valores baixos de  $PM_{10}$  observados de dia podem ser justificados pela maior dispersão de poluentes existente durante o período diurno.

É de salientar que os mesmos perfis obtidos para o período de Verão e Inverno, separadamente, apresentam uma variação similar apesar da magnitude dos valores ser diferente. Assim sendo, conclui-se que, de um modo geral, a classificação das estações de monitorização em estudo foi correctamente atribuída, apesar do caso de Vila Nova da Telha carecer de confirmação ou revisão adicional.

Esta análise torna-se particularmente importante para a validação dos modelos de qualidade do ar, nomeadamente quando esta é efectuada pela comparação directa entre os valores observados e os modelados para a célula da malha de simulação onde está localizada a estação. A representatividade das estações constitui um conhecimento base para a correcta interpretação dos resultados da modelação [Pittau *et al.*, 1999; Tchepel *et al.*, 2007].

### 2.3.2 Ozono

A análise das concentrações horárias de ozono, em termos dos valores máximo, médio (diurno) e mínimo observados nas 4 estações ao longo do período de estudo, é apresentado na Figura 2.9.

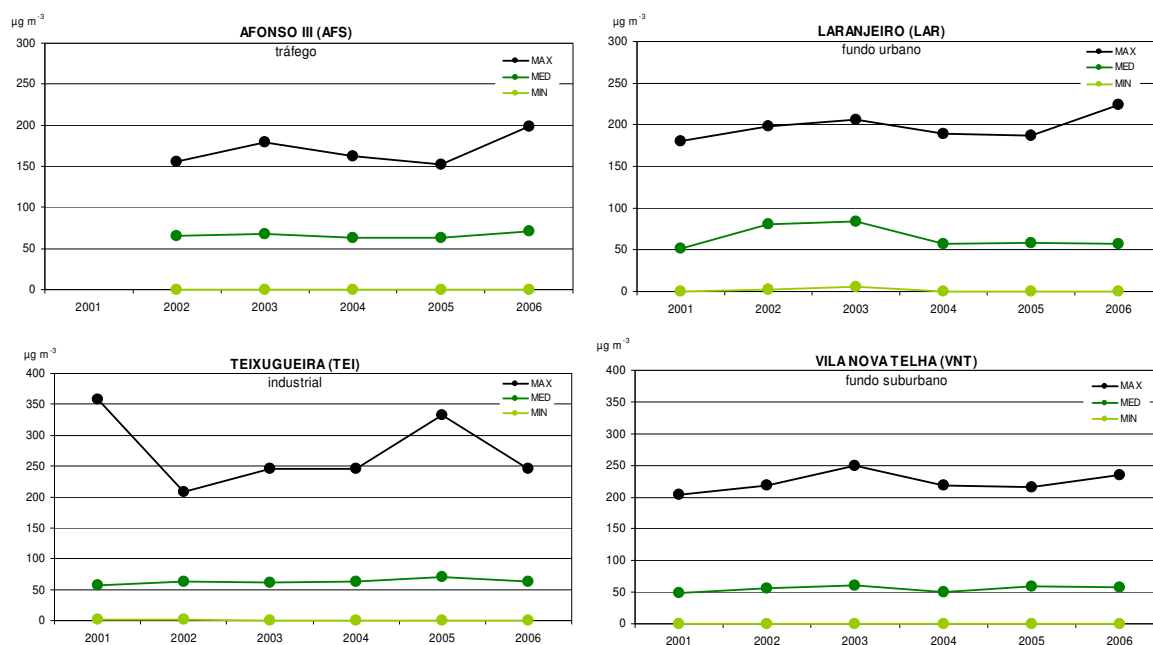


Figura 2.9. Evolução do valor médio (diurno), máximo e mínimo de  $O_3$  para as estações em estudo, entre 2001 e 2006.

De um modo geral, não há uma variação temporal significativa ao longo dos 6 anos de estudo em termos dos valores médios diurnos e mínimos analisados, com excepção da estação do Laranjeiro que apresentou em 2002 e 2003 níveis de fundo de  $O_3$  superiores à média registada nos restantes anos. Relativamente aos picos de  $O_3$  realça-se a estação de Teixugueira, onde se registaram os valores máximos e uma acentuada variabilidade destes, figurando 2001 e 2005 como os anos mais críticos. Nas restantes estações, foi em 2003 e 2006 que se registaram concentrações máximas mais elevadas. Em termos da magnitude dos valores, há a salientar que, apesar da média diurna anual de  $O_3$  ( $\approx 60 \mu g m^{-3}$ ) ser semelhante em todos os casos, as concentrações mais elevadas registaram-se nas estações localizadas na região Norte e Centro (Vila Nova da Telha e Teixugueira), com valores máximos de ozono sempre acima dos  $200 \mu g m^{-3}$ .

A Figura 2.10 mostra o número de dias em que houve incumprimento dos limiares horários de informação ( $180 \mu g m^{-3}$ ) e alerta ( $240 \mu g m^{-3}$ ) ao público. O panorama de incumprimento mantém-se quando se analisam as excedências ao valor alvo legislado para o ozono no que diz respeito à saúde humana (Figura 2.11a). Este incumprimento é verificado em todos os anos na estação de Teixugueira, sendo particularmente notório no ano de 2003, no Laranjeiro, e em todas as estações

em 2006. A elevada ocorrência de incêndios florestais nestes dois anos [DGRF, 2006] será uma das justificações a apontar para tal facto.

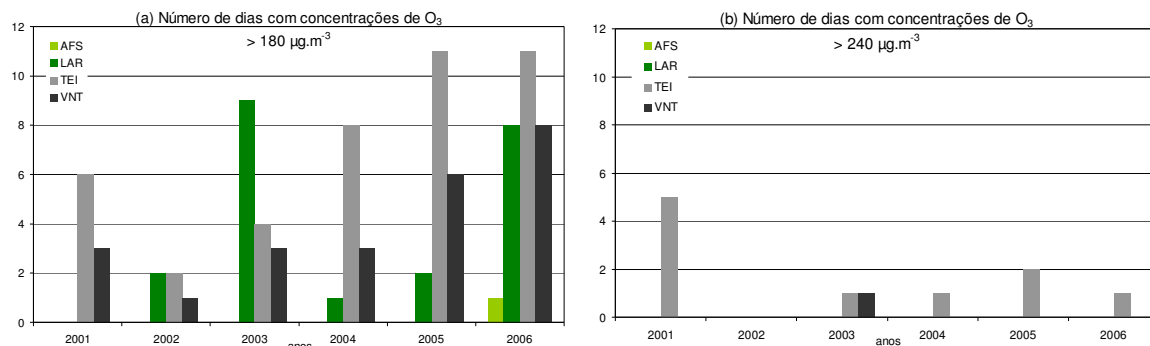


Figura 2.10. Ultrapassagens ao (a) limiar horário de informação e (b) alerta ao público para a protecção da saúde humana ao ozono, durante o período de estudo 2001-2006.

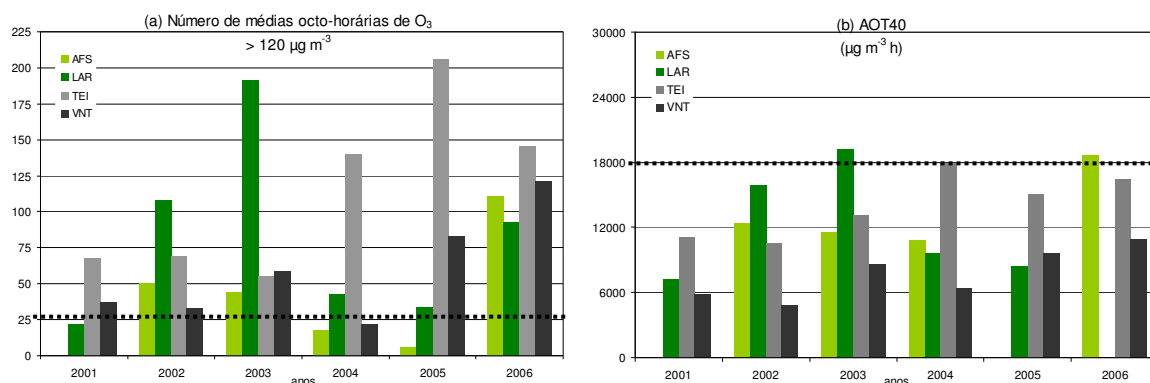


Figura 2.11. Ultrapassagens ao (a) valor alvo, para 2010, para protecção da saúde humana e (b) evolução do valor de AOT40 para a protecção da vegetação ao ozono, durante o período em estudo (2001-2006).

É de salientar a importância e individualidade dos vários parâmetros legislados analisados, permitindo avaliar distintamente os efeitos agudos na população devidos à exposição ao  $O_3$  de curta duração (limiar horário de alerta) e à exposição prolongada (médias octo-horárias). A estação Afonso III (AFS) ilustra bem este facto, dado que registou valores máximos horários significativamente baixos mas médias octo-horárias acima do previsto pela legislação.

Relativamente à protecção da vegetação, apenas em algumas estações (Laranjeiro e Afonso III), e nos anos de 2003 e 2006, se registaram excedências aos valores máximos legislados de AOT40 ("Accumulated Ozone dose over a Threshold of 40 ppb") (Figura 2.11b). As ultrapassagens verificam-se nas estações com carácter urbano, indiciando concentrações de fundo elevadas nas cidades. No entanto, se em vez do valor alvo se analisar o cumprimento do objectivo de longo prazo definido para o ozono ( $6000 \mu g.m^{-3}.h$ ), o cenário é bem diferente, já que quase todas as estações apresentam concentrações cumulativas superiores à prevista pela legislação.



### 2.3.3 Partículas

Foi realizado o mesmo tipo de tratamento estatístico para o caso das  $PM_{10}$ , para as várias estações de monitorização (Figura 2.12). Em termos de evolução temporal, identifica-se o ano de 2004 como o mais crítico em termos de valores máximos atingidos, com excepção da estação de Vila Nova da Telha. A preparação e realização do Campeonato Europeu de Futebol (Euro 2004) poderá estar na origem destes episódios, já que este envolveu a construção de vários estádios de futebol (Aveiro, Lisboa e Faro, por exemplo) e a visita e movimentação de milhares de participantes. O valor médio de  $PM_{10}$  ao longo dos 6 anos em estudo é cerca de  $30\text{--}40\text{ }\mu\text{g m}^{-3}$ . Não há nenhuma tendência evidente na evolução das concentrações de  $PM_{10}$ , o que poderá estar associado ao carácter distinto das estações de monitorização em estudo.

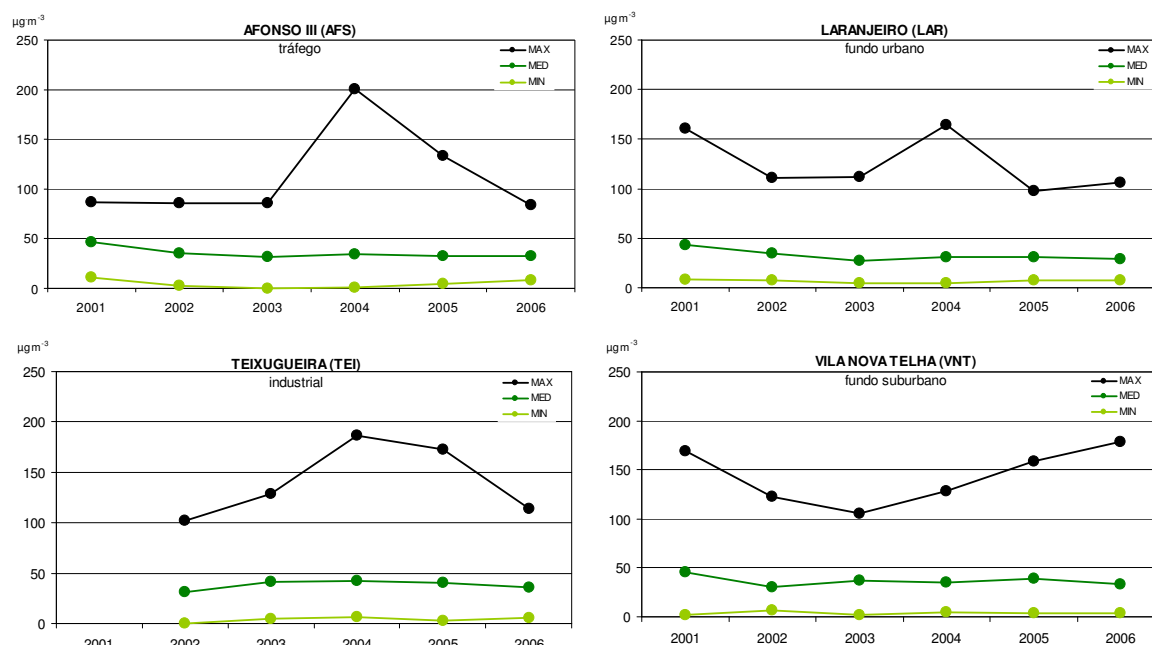


Figura 2.12. Evolução do valor médio, máximo e mínimo das médias diárias de  $PM_{10}$  para as estações em estudo, entre 2001 e 2006.

Analisando em maior detalhe a evolução das médias anuais de  $PM_{10}$  (Figura 2.13a), observa-se um decréscimo acentuado, em todas as estações, nos valores observados em 2002. Entre 2002 e 2003, registou-se uma segunda redução dos valores médios de partículas nas estações do Sul do país (LAR e AFS), mas um aumento no caso das estações do Norte e Centro (VNT e TEI), seguido de uma estabilização nos anos seguintes. A interpretação desta diferença de comportamento entre as estações exige uma análise mais detalhada dos valores observados nas restantes estações de monitorização, de modo a perceber se se trata de um comportamento de carácter regional ou apenas de um fenómeno local.

É ainda de salientar o valor médio bastante elevado registado em 2001, nos vários locais de monitorização, superior ao limite legislado ( $40 \mu\text{g m}^{-3}$ ). Para além disso, e tal como verificado para o  $\text{O}_3$ , as concentrações mais elevadas são registadas nas estações localizadas na região Norte e Centro (Teixugueira e Vila Nova Telha), apesar do carácter de fundo suburbano desta última. Na estação de Teixugueira existe, inclusivamente, um incumprimento da legislação vigente no que diz respeito à saúde humana.

O cumprimento desta legislação, mas em termos de médias diárias, é analisado na Figura 2.13b. O número de dias por ano com ultrapassagens do valor limite diário é, tal como nas médias anuais, maior nas estações de Teixugueira ( $> 80$  dias) e Vila Nova da Telha ( $> 50$  dias), apesar de existirem dias com excedências em todas as estações, ao longo do período de tempo estudado. Comprova-se ainda, nesta análise, que 2002 foi o ano com menor número de incumprimentos.

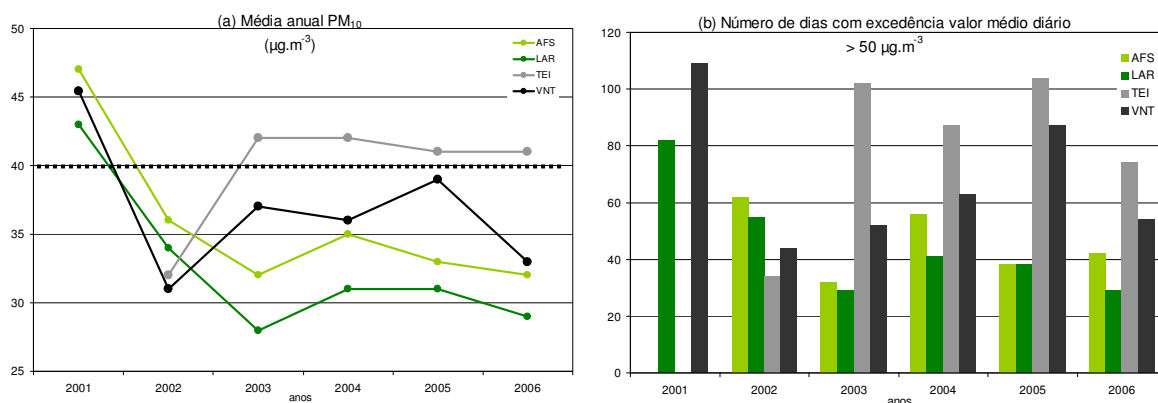


Figura 2.13. Comparação entre a (a) média anual e (b) números de dias com ultrapassagem do valor limite diário de  $\text{PM}_{10}$  para as várias estações em estudo, entre 2001-2006.

Apesar da análise efectuada, é fundamental referir que se trata de um número muito restrito de estações para avaliar a qualidade do ar de uma forma alargada, permitindo apenas tirar conclusões limitadas à área de influência de cada estação. Este número reduzido é devido, sobretudo, à pouca densa rede de monitorização existente até 2003 (histórico de dados muito limitado), aliada a uma elevada ineficiência de operação.

Torna-se urgente, para qualquer actividade de investigação ou mesmo de gestão e controlo dos níveis de poluição que se baseie na monitorização, desenvolver e aplicar uma metodologia periódica de manutenção preventiva e calibração dos sensores. Só assim se obterão séries com um nível de eficiência suficientemente elevado e fiável. Neste quadro, a utilização de modelos numéricos passa de meio complementar de análise a único meio disponível de trabalho para o diagnóstico e avaliação da qualidade do ar em Portugal.

## 2.4 Campanhas experimentais com tubos de difusão

Quando o número de estações de monitorização é insuficiente para reflectir a realidade em toda a sua extensão, a Directiva-Quadro estabelece, no seu artigo 5º (Avaliação preliminar da qualidade do ar ambiente), a necessidade “dos Estados-membros que não disponham para todas as zonas e aglomerações de medições representativas dos níveis poluentes, procederem a campanhas de medição representativas, inquéritos ou avaliações” que lhes permitam dispor desses mesmos dados. Neste sentido, e por forma a efectuar a avaliação preliminar da qualidade do ar ambiente em todo o território nacional, durante o ano de 2001, realizaram-se campanhas de medição recorrendo à utilização do método de amostragem por difusão passiva - tubos de difusão [Ferreira *et al.*, 2001; Ferreira *et al.*, 2002].

Estas medições não têm por objectivo demonstrar o cumprimento dos valores limite, mas sim fornecer informação sobre a qualidade do ar em áreas em que esta é desconhecida e/ou a informação sobre emissões é insuficiente, e que permita ajudar na definição da futura estratégia de avaliação [EEA, 1998]. Este tipo de amostragem permite calcular as concentrações médias verificadas no ar ambiente durante o período de exposição dos tubos, sendo possível criar mapas da distribuição espacial das concentrações dos poluentes medidos recorrendo a técnicas de interpolação dos dados (geoestatística). Esta técnica é pouco adequada para a verificação de limites de curto prazo (horários e diários), uma vez que o período de exposição dos tubos varia entre alguns dias e algumas semanas, sendo mais indicada para a avaliação de longo prazo.

A realização de duas campanhas a nível nacional, uma em período mais quente, no Verão de 2000, e outra em período mais frio, realizada na Primavera de 2001 (e não no Inverno, como inicialmente previsto devido a atrasos relacionados com aspectos logísticos e de meios humanos para a realização das campanhas), teve como objectivo amostrar duas alturas diferentes do ano. A realização de uma terceira campanha no interior do país (Verão de 2001) surgiu com o intuito de confirmar os resultados que foram obtidos nas campanhas realizadas a nível nacional e ainda pelo facto de na 1ª campanha (Verão de 2000) as condições meteorológicas não terem sido as mais representativas do período de Verão.

O período de amostragem recomendado pela Agência Europeia do Ambiente (EEA) [Van Aalst *et al.*, 1998] para este tipo de campanhas, é de 20% do ano. No caso do ano 2001, foram realizadas apenas 2 campanhas experimentais, de 7 a 21 de Maio de 2001 (1ª campanha) e de 21 a 29 de Junho de 2001 (2ª campanha), compreendendo um total de duas semanas de amostragem. Tendo em consideração os objectivos da campanha e as recomendações da EEA, foi definida uma malha dividida em quadrículas de 20 x 20 km<sup>2</sup>, escolhida de forma a assegurar um compromisso satisfatório entre factores económicos e de representatividade espaço-temporal.

A selecção dos pontos de amostragem teve por base os critérios EUROAIRNET para estações de fundo [EEA, 1999]. A malha definida para as campanhas está representada na Figura 2.14.

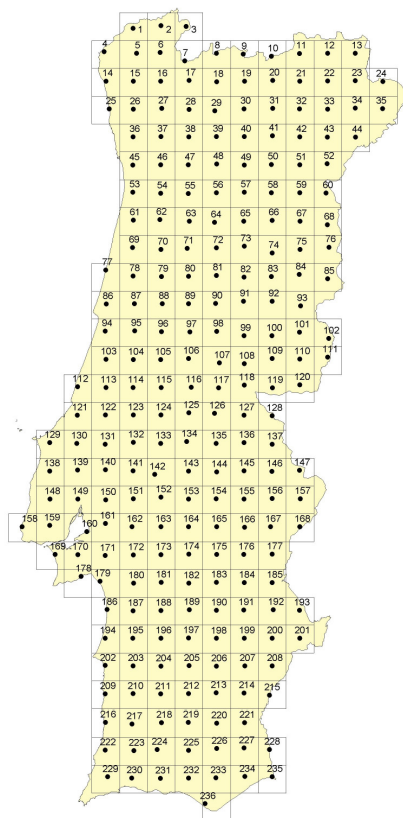


Figura 2.14. Representação esquemática da malha usada nas campanhas de medição com tubos de difusão, realizadas em 2001 [Ferreira *et al.*, 2001].

A título de exemplo apresentam-se na Figura 2.15 os resultados para  $\text{NO}_2$  e  $\text{O}_3$ , sob a forma de mapas de curvas de isoconcentração, das campanhas realizadas em 2001, obtidos através do algoritmo de interpolação “Kriging” [Ferreira *et al.*, 2002].

A sobreposição dos dois mapas evidencia a relação entre os dois poluentes. O dióxido de azoto, emitido principalmente ao nível dos grandes centros urbanos, onde o tráfego rodoviário é mais intenso, é transportado e precursor das elevadas concentrações de ozono que se registam em pontos afastados dos grandes aglomerados populacionais localizados no litoral do país. Destas regiões remotas, destacam-se algumas de maior altitude (nordeste do país) e com forte radiação solar (Alentejo e Algarve), factores com uma importância primordial nos mecanismos de formação do ozono troposférico. Para além disso, o facto de se tratar de áreas limítrofes do território nacional, acusa a influência do transporte transfronteiriço de poluentes atmosféricos, em particular de precursores de ozono.

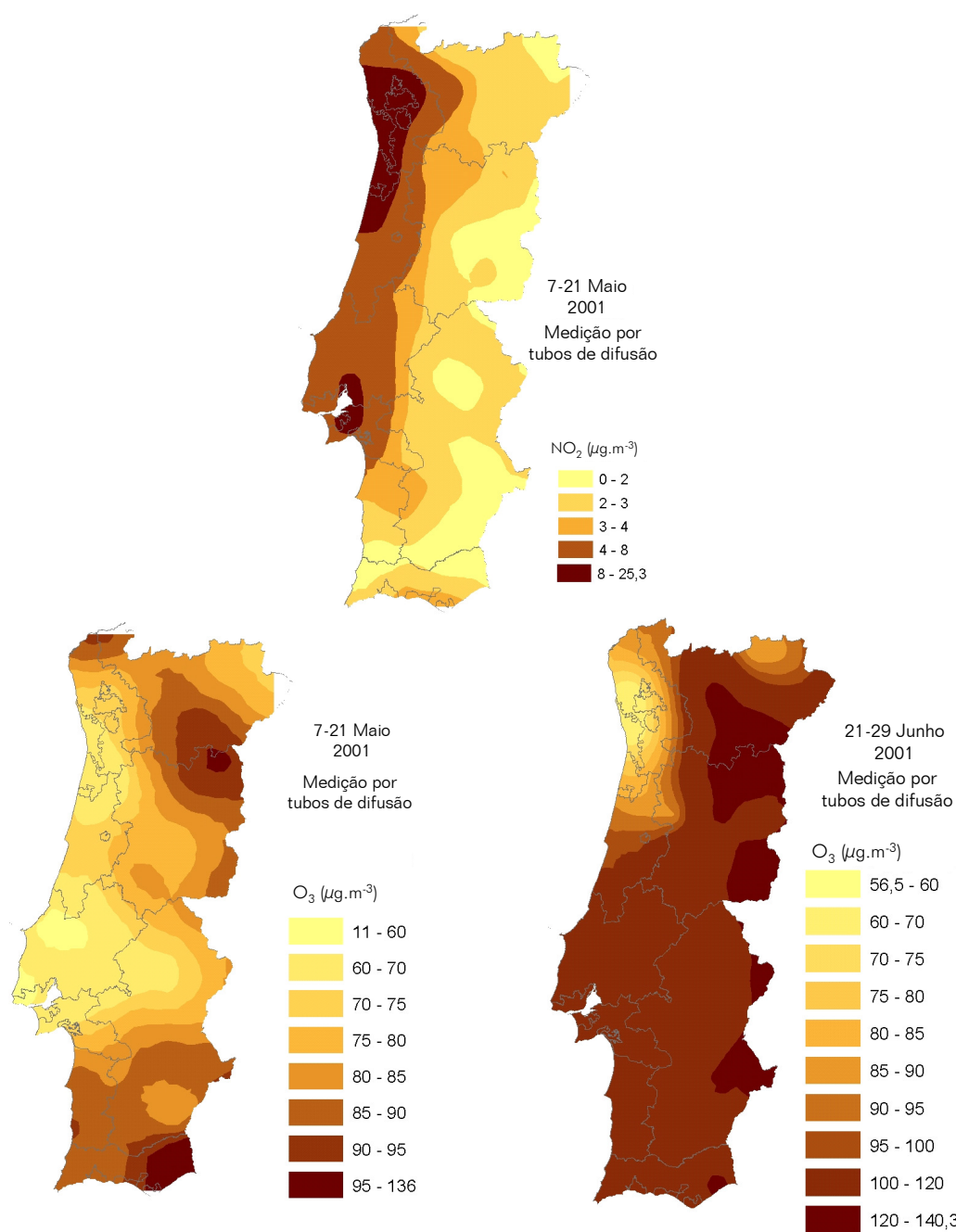


Figura 2.15. Concentrações médias de  $\text{NO}_2$  e  $\text{O}_3$  obtidas nas campanhas com tubos de difusão realizadas em 2001.

As concentrações de ozono menos elevadas nas áreas urbanas devem-se, parcialmente, às reacções de consumo de ozono pelo monóxido de azoto presente em maiores concentrações neste tipo de ambientes. Atendendo à localização das principais fontes emissoras de óxidos de azoto, precursores do ozono, na faixa litoral de Portugal Continental e às direcções predominantes do vento (N-NW), as concentrações de ozono mais elevadas no interior do país sugerem um transporte dos seus precursores do litoral para o interior.

As condições meteorológicas, directamente relacionadas com os fenómenos de dispersão, transporte e química, são factores essenciais a ter em conta na análise interpretativa dos resultados obtidos nas campanhas e permitem explicar algumas das diferenças observadas nos resultados, quer em termos de distribuição relativa das concentrações do ozono, quer mesmo em termos dos níveis de concentrações registados. Outro factor que se tem constatado ser importante nos níveis de ozono troposférico é o efeito da altitude. Este efeito é resultado da mistura vertical entre a camada limite atmosférica e a troposfera livre [Barros, 1999]. O aumento da concentração de ozono com a altitude é resultado de diferentes factores, entre os quais se contam: (i) a maior intensidade de radiação solar nas altitudes mais elevadas; (ii) o transporte dos precursores de ozono provenientes de áreas urbanas e industriais, que nas zonas de maior altitude encontram condições propícias à formação deste poluente; e ainda (iii) o estreitamento da camada de mistura que os acidentes de relevo impõem, conduzindo a que o volume parcial do ozono troposférico seja distribuído numa faixa atmosférica menor.

É de salientar que este tipo de medições não permite, no entanto, a comparação directa das concentrações obtidas com os limiares previstos na legislação, visto que os valores estabelecidos se referem a períodos horários, octo-horários e diários, enquanto as concentrações médias resultantes da campanha correspondem a um período de exposição de 7 dias.

Estes dados vêm reforçar a necessidade da modelação numérica, como uma ferramenta útil e indispensável para o diagnóstico (e prognóstico) da qualidade do ar ambiente, que deve contudo, sempre que possível, ser combinada com os dados monitorizados. A monitorização descrita neste capítulo é, para além disso, de primordial importância para o trabalho de modelação da qualidade do ar, viabilizando, ou não, a sua aplicação através de procedimentos de validação.



## Chapter III.

### The air quality modelling system

The numerical modelling system applied for mainland Portugal over a long-term period (2001-2006) consists of the meteorological mesoscale model MM5 [Dudhia, 1993] and the chemistry-transport model CHIMERE [Schmidt *et al.*, 2001]. The MM5 meteorological model was applied with different resolutions according to the domain of simulation (36x36 km<sup>2</sup> for the European domain and 9x9 km<sup>2</sup> for mainland Portugal domain) with an extension that encompasses the CHIMERE domains and 32 vertical levels, using a one-way nesting procedure. The MM5 model generates the several meteorological fields required by CHIMERE, such as wind, temperature, mixing ratio for water vapor and liquid water in clouds, 2-m temperature, surface heat and moisture fluxes and precipitation.

CHIMERE is a tri-dimensional chemistry-transport model, based on the integration of the continuity equation for the concentrations of several chemical species in each cell of a given grid. It was developed for simulating gas-phase chemistry [Schmidt *et al.*, 2001], aerosol formation, transport and deposition [Bessagnet *et al.*, 2004; Vautard *et al.*, 2005] at European and urban scales. The meteorological input variables driven by the MM5 model are linearly interpolated to the CHIMERE grid. In addition to the meteorological input, the CHIMERE model needs boundary and initial conditions, emission data, and the land use and topography characterization. The non-methane volatile organic compounds (NMVOCs) are disaggregated into 227 individual VOCs according to the speciation suggested by Passant [2002] for each activity sector. The methodology for biogenic emissions of isoprene and terpenes is described in Schmidt *et al.* [2001]. The land use database comes from the Global Land Cover Facility [Hansen *et al.*, 2000], providing the grid cell coverage of coniferous and broadleaf forests. The Stohl *et al.* [1996] methodology is used for biogenic emissions of NO from fertilized soils. The model simulates the concentration of 44 gaseous species and 6 aerosol chemical compounds. The gas-phase chemistry scheme, derived from the original complete chemical mechanism MELCHIOR [Lattuati, 1997], has been extended to include sulfur aqueous chemistry, secondary organic chemistry and heterogeneous chemistry of HONO and nitrate [Hodzic



*et al.*, 2005]. The population of aerosol particles is represented by a sectional formulation, assuming discrete aerosol size sections and considering the particles of a given section to be internally mixed. Six diameter bins ranging between 10 nm and 40  $\mu\text{m}$ , with a geometric increase of bin bounds, are used. The aerosol model accounts for both inorganic and organic species, of primary or secondary origin, such as primary particulate matter (PPM), sulfates, nitrates, ammonium, secondary organic species (SOA) and water. PPM is composed of primary anthropogenic species such as elemental and organic carbon, and mineral materials. The ISORROPIA equilibrium model [Nenes *et al.*, 1999] is used to calculate concentrations at equilibrium for inorganic aerosols. Pollutants can be removed by dry deposition [Wesely and Hicks, 1977; Seinfeld and Pandis, 1998] and wet removal [Guelle *et al.*, 1998]. The numerical method for the time solution of the stiff system of partial differential equations is the second-order TWOSTEP algorithm originally proposed by Verwer [1994].

In the present application, the model was applied first at a European scale (with 50 x 50  $\text{km}^2$  resolution) and then to mainland Portugal using the same physics and a simple one-way nesting technique, with 10 x 10  $\text{km}^2$  horizontal resolution. The vertical resolution consists of eight vertical layers of various thicknesses extending from ground to 500 hPa, with the first layer at 50 m. Lateral and top boundaries for the large-scale run are obtained from the MOZART (gas species) and GOCART (aerosols) global climatological models [Horowitz *et al.*, 2003; Ginoux *et al.*, 2001]. Transport of Saharan dust from the GOCART boundary conditions, as well as within-domain erosion, are considered using the formulation of Vautard *et al.* [2005]. For the Portugal domain, boundary conditions are provided by the large-scale simulation.

The model version used here is primarily described in Schmidt *et al.* [2001] and further updates, especially for the aerosols module, can be found in Bessagnet *et al.* [2004]. The model requires hourly spatially resolved emissions for the main anthropogenic gas and aerosol species. For the large-scale simulation, the anthropogenic emissions are provided by EMEP [Vestreng, 2003]. The national inventory INERPA was used over the mainland Portugal domain [Monteiro *et al.*, 2005]. This inventory takes into account annual emissions from line sources (streets and highways), area sources (industrial and residential combustion, solvents and others) and large point sources (with available monitoring data at each industrial plant). A comparison exercise, based on the modelling results obtained using the three emission inventories available for Portugal (EMEP, LOTOS and INERPA), was performed to evaluate the uncertainty associated with the used emission inventory. This intercomparison shows no significant discrepancies between their direct model applications. INERPA was selected for this study simulation because it presents less systematic errors, even with a probable overestimation over specific areas [Monteiro *et al.*, 2007a]. Time disaggregation was calculated by application of monthly, weekly, and hourly profiles obtained in the scope of the GENEMIS Project [GENEMIS, 1994]. Resuspension of material other than soil particles is not taken into account because of the large uncertainty of this process [Ketzel *et al.*, 2006].

## Capítulo III

### 3. Sistema de modelação da qualidade do ar

Neste capítulo é abordada a modelação da qualidade do ar, desde o seu estado actual de conhecimento e investigação, até à sua selecção como ferramenta base para este trabalho. É ainda descrito o sistema de modelação e a sua aplicação ao caso de estudo de Portugal Continental, para além do respectivo inventário de emissões e sua desagregação espaço-temporal.

#### 3.1 Estado-da-arte da modelação da qualidade do ar

Um modelo é geralmente definido como uma representação matemática da realidade [Reid *et al.*, 2007]. Devido à sua natureza não reprodutível no tempo, os processos atmosféricos, tanto físicos como químicos, têm beneficiado da aplicação de modelos físicos e numéricos, quer no que se refere à compreensão do fenómeno em si, quer à possibilidade de melhoria do sistema de observação implementado para a sua monitorização.

A modelação numérica da qualidade do ar tem vindo a tornar-se uma ajuda poderosa para a avaliação e gestão da qualidade do ar, devido à sua capacidade de estimar concentrações de poluentes atmosféricos em todo o domínio de simulação de interesse. Para além disso, e tal como já atrás referido, a sua aplicação é definida e recomendada pela Directiva-Quadro da qualidade do ar como instrumento de apoio à decisão política e tem sido usada, no âmbito do programa CAFE, em estudos da repercussão de cenários de emissões nas concentrações de poluentes, nomeadamente o ozono e a matéria particulada, e seus impactos na saúde e na vegetação [Thunis *et al.*, 2007; Vautard *et al.*, 2007].

Existem vários tipos de modelos atmosféricos dependendo do tipo e da gama de aplicação. Quanto ao âmbito de aplicação, um modelo diz-se de diagnóstico quando é aplicado a uma situação passada e de prognóstico quando é aplicado a uma situação futura, permitindo fazer previsão. Quanto ao tipo

de modelo consideram-se 3 grandes grupos: modelos de dispersão, químicos e de receptor. Os modelos de dispersão são usados para estimar a concentração de poluentes, em pontos específicos, emitidos por uma ou mais fontes emissoras, considerando apenas a dispersão do poluente e não a sua possível transformação química. Os modelos químicos de transporte (vulgarmente designados “CTM – Chemical Transport Models”) são aplicados a escalas espaciais maiores e simulam o impacto de todas as fontes emissoras de uma dada região nas concentrações de poluentes atmosféricos e na deposição de espécies químicas inertes ou reactivas. Estes modelos consideram, para além do transporte e dispersão dos poluentes, os processos de transformação química a eles associados. Os modelos de receptor baseiam-se nas concentrações medidas de poluentes e na composição das emissões das fontes relevantes para calcular as suas contribuições relativas no ponto receptor, assumindo uma relação linear entre emissões e concentrações [Reid *et al.*, 2007].

Quanto à escala espacial de aplicação, consideram-se três grandes escalas de modelação: local, mesoscala e global. Tradicionalmente, os problemas de poluição atmosférica eram de percepção local, tendo a modelação começado a esta escala para avaliar o impacto de fontes emissoras individuais, ou pequenos grupos de fontes, sobre distâncias até algumas dezenas de quilómetros. Este processo é geralmente modelado assumindo uma distribuição gaussiana, na horizontal e na vertical, das concentrações de um poluente emitido por uma chaminé com uma dada velocidade inicial e a uma temperatura normalmente superior à temperatura do ar. Usam-se algumas variações da dispersão gaussiana para tratar situações mais complexas, de forma a contemplar, por exemplo, várias fontes, o impacto da pluma no solo ou o seu confinamento pela topografia, o comportamento especial sob condições de estabilidade da camada limite e ainda o efeito de edifícios no comportamento da pluma [Hanna *et al.*, 2001a]. A evolução do conhecimento da estrutura da atmosfera levou ao desenvolvimento de outra geração de modelos de dispersão local, baseados na parametrização da camada limite e na resolução das equações de Navier-Stokes por métodos de diferenças finitas e volumes finitos [Li *et al.*, 2006].

Mais recentemente, as questões ambientais assumiram uma escala global (aquecimento global, depleção da camada de ozono, etc.), conduzindo à elaboração de modelos que considerassem o transporte de poluentes na atmosfera sem nenhuma restrição no domínio de simulação. Este tipo de modelos estava confinado a simulações de alterações climáticas (tendo o CO<sub>2</sub> como base) com uma descrição química da atmosfera muito simplificada, e consequentemente menos exigentes ao nível computacional. Assiste-se agora à sua expansão para outro tipo de poluentes, quer gasosos [Horowitz *et al.*, 2003], quer aerossóis [Ginoux *et al.*, 2001], permitindo a descrição e previsão, com maior rigor, da evolução da composição química da atmosfera num clima futuro. O extenso domínio de aplicação destes modelos obriga, no entanto, ao uso de uma resolução espacial grosseira para manter razoáveis os esforços computacionais.

Estudos à mesoscala consideram escalas espaciais desde algumas dezenas de quilómetros (escala urbana) a alguns milhares (escala regional). Esta é a gama de escalas representativa de problemas de poluição atmosférica particularmente importantes e que atravessam frequentemente as fronteiras jurisdicionais, sendo, por isso, a escala de modelação mais relevante e adequada para o suporte à decisão política [Moussiopoulos, 1996]. A mesoscala está sub-dividida em  $\gamma$  (até 10 km),  $\beta$  (até 100 km) e  $\alpha$  (também denominada escala regional) que vai até aos 1000 km [Reid *et al.*, 2007]. Estes modelos de mesoscala podem ainda ser classificados, de acordo com a formulação matemática que usam, como modelos lagrangianos ou eulerianos.

Os modelos lagrangianos consideram que as parcelas de ar viajam com o escoamento atmosférico, isto é, sofrem processos de advecção. Estes modelos são também chamados modelos de trajectória, dado que as parcelas de ar seguem a trajectória definida pela circulação atmosférica. O tempo de trajectória é tipicamente de 3 a 5 dias, numa aplicação à escala regional. As trajectórias são normalmente calculadas como segmentos lineares, cada um deles cobrindo 3 a 6 horas. O comprimento e a direcção do segmento são determinados através da intensidade e direcção médias do vento em cada resolução temporal de cálculo [Draxier e Hess, 1998]. Estes modelos são simples em termos computacionais e permitem uma fácil determinação de fluxos transfronteiriços, sendo especialmente convenientes para um número pequeno de fontes ou receptores.

Por outro lado, os modelos eulerianos consideram uma estrutura matemática ancorada à superfície da Terra, como se pode ver na Figura 3.1a. Estes modelos são também conhecidos como modelos de grelha, visto a sua estrutura ser uma grelha tridimensional (3D) e se considerar a emissão de poluentes em cada célula da grelha. Os poluentes percorrem a grelha sob a influência do escoamento atmosférico e sofrem transformações químicas e físicas (Figura 3.1b).

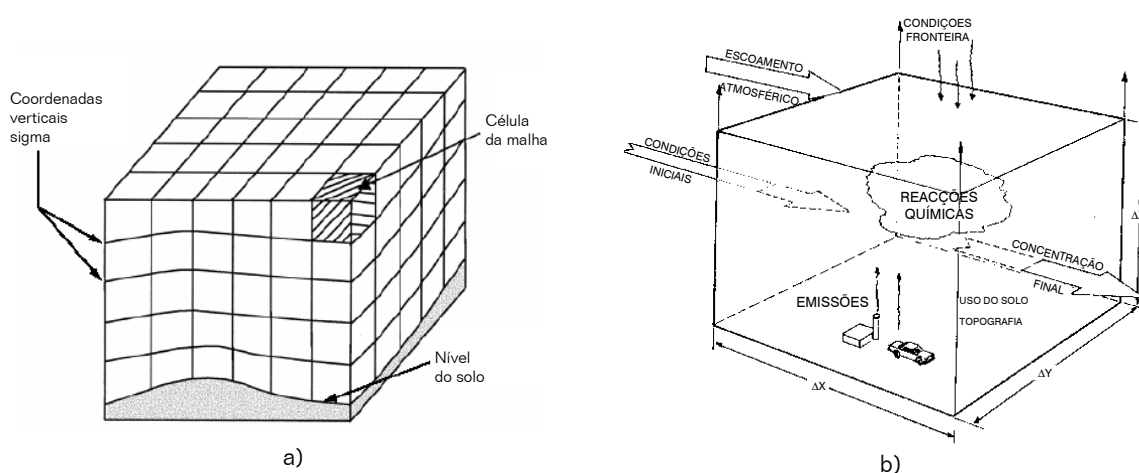


Figura 3.1. Estrutura da modelação euleriana [Reid *et al.*, 2007].

Ao contrário dos lagrangianos, os modelos eulerianos incluem o tratamento dos fenómenos não lineares associados aos processos físicos e químicos que ocorrem na atmosfera (emissões, dispersão, transporte, química e deposição), sendo por isso computacionalmente mais exigentes. Para a simulação e integração dos vários processos referidos, estes modelos necessitam de diversos dados de entrada, muitas vezes gerados por outros modelos (por ex. meteorológicos, de emissões), sendo, por isso, mais correcto falar num sistema de modelos do que num modelo de qualidade do ar [Reid *et al.*, 2007]. É possível ainda a conjugação, a três dimensões, do módulo meteorológico e do módulo químico, permitindo o cálculo simultâneo (em cada passo temporal da integração numérica) das variáveis meteorológicas e dos campos de concentrações [Tulet *et al.*, 2003].

A vasta gama de complexidade possível no tratamento de processos individuais pelos modelos regionais eulerianos leva a que estes difiram na resolução vertical, nas parameterizações usadas, no método de inicialização e de obtenção das condições fronteira ou ainda nas técnicas numéricas aplicadas [Holmes e Morawska, 2006].

Os modelos de qualidade do ar tridimensionais eulerianos foram inicialmente desenvolvidos e aplicados, de uma forma extensiva, para a compreensão do processo de formação de ozono [Moussiopoulos, 1996], tendo-se apostado, mais recentemente, no desenvolvimento de módulos específicos para a simulação da química dos aerossóis [Hass *et al.*, 2003; Bessagnet *et al.*, 2004; Van Dingenen *et al.*, 2004]. Em ambas as aplicações, a modelação da qualidade do ar é usada tanto para fins de diagnóstico e avaliação [Simpson, 1992; Monteiro *et al.*, 2007b; Borrego *et al.*, 2006a], como de previsão operacional e de cenários futuros, de forma a estimar os efeitos de alterações (de emissões, meteorologia, etc.) nas concentrações de poluentes [Vautard *et al.*, 2001; Borrego *et al.*, 2002a].

A simulação da fotoquímica exige a inclusão do conjunto de reacções químicas responsáveis pela formação do ozono e a devida parametrização da cinética química. Estas, juntamente com a integração dos processos físicos de transporte, dispersão e deposição (ditados pelas variáveis meteorológicas) e das emissões antropogénicas e biogénicas, variáveis no tempo e no espaço, permitem a estimativa da concentração dos vários poluentes gasosos e, em particular, do ozono [Seinfeld e Pandis, 1998].

O desenvolvimento recente da modelação de aerossóis foi ditado pela elevada complexidade de processos físicos e químicos envolvidos (ver esquema simplificado na Figura 3.2), muitos deles ainda por conhecer [Pio *et al.*, 2007; Pun *et al.*, 2007]. O número de espécies químicas implicadas (tanto inorgânicas como orgânicas) é muito elevado e com origem primária e secundária (sulfatos, nitratos, amónia e espécies orgânicas secundárias). De facto, é reconhecido cientificamente que a matéria particulada primária sofre alterações rápidas, logo na primeira hora a seguir à sua emissão, crescendo por condensação e coagulação com partículas já existentes [Bessagnet *et al.*, 2004] e formando novas partículas por processos de nucleação [Kulmala *et al.*, 1998]. Durante este

processo, são formados vários compostos orgânicos secundários (SOA) [Bessagnet *et al.*, 2004]. Em termos químicos, a modelação dos aerossóis deve incluir a química do enxofre em fase aquosa, a química dos aerossóis secundários e as reacções químicas heterogéneas do ácido nitroso (HONO) e nitrato [Hodzic *et al.*, 2005]. Para além da composição química, as partículas de aerossóis devem ser caracterizadas pela sua distribuição de tamanhos, vulgarmente representada por uma formulação sectorial que assume uma distribuição discreta em vários tamanhos de diâmetro, considerando, ou não, as partículas com a mesma secção totalmente misturadas. Há ainda a ter em conta os processos de remoção de partículas que podem ocorrer por deposição seca ou húmida [Seinfeld e Pandis, 1998] bem como o equilíbrio termodinâmico estabelecido entre a fase gasosa e particulada para as espécies semi-voláteis.

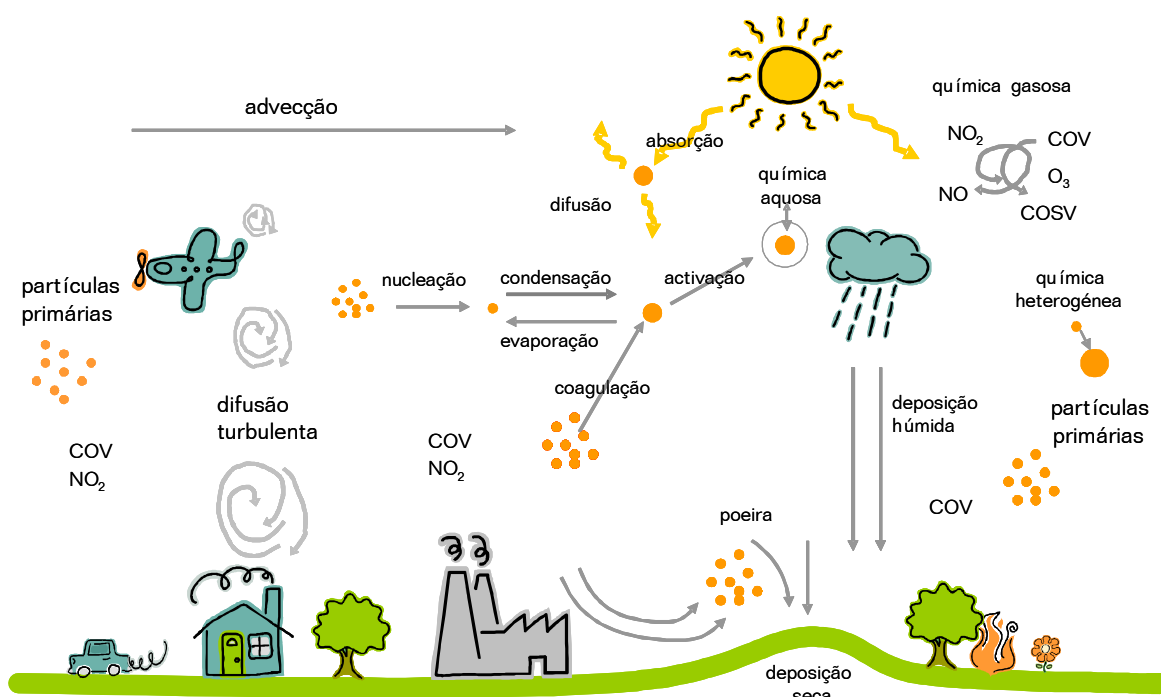


Figura 3.2. Esquema simplificado da modelação da qualidade do ar.

Independentemente do seu tipo e aplicação, todos os modelos de qualidade do ar necessitam de ser avaliados para que os seus resultados possam ser utilizados com confiança, quer ao nível científico, quer como suporte de decisões e estratégias políticas com consequências directas na saúde e economia. Para tal, é necessário associar a qualquer aplicação da modelação da qualidade do ar um conjunto de procedimentos de controlo e garantia da qualidade, seguindo os objectivos de qualidade já definidos pela actual Directiva-Quadro e complementado-os, se possível, com uma análise mais detalhada da estimativa de incertezas [Borrego *et al.*, 2007].

No caso particular da aplicação a Portugal Continental e do objectivo de diagnóstico e prognóstico da qualidade do ar (quer de poluentes fotoquímicos, quer de aerossóis), a modelação envolve a

simulação dos processos atmosféricos físicos e químicos numa região relativamente alargada, sendo os modelos eulerianos à escala regional os mais adequados. Este tipo de modelação implica o conhecimento/simulação dos parâmetros meteorológicos de interesse, juntamente com as emissões e a qualidade do ar do domínio de estudo. Para além disso, a aplicação a Portugal reveste a modelação da qualidade do ar de um problema adicional, existente em regiões costeiras e associado às circulações térmica de mesoscala aí prevaletentes. A presença e importância das circulações de mesoscala, na costa portuguesa, tem sido apontada, desde há vários anos, por diversos autores, baseados quer em trabalhos de modelação numérica, quer em trabalhos de campo [Coutinho, 1995; Coutinho e Borrego, 1991; Borrego *et al.*, 1994; Borrego, 1996; Barros, 1999; Barros *et al.*, 2003; 2003; Evtyugina *et al.*, 2006].

Actualmente existem vários modelos (ou sistemas de modelos) capazes de simular a química de poluentes gasosos e particulados a longo prazo e à escala regional, como é o caso dos modelos europeus EMEP, LOTOS-EUROS e CHIMERE [Van Loon, 2004; Vautard *et al.*, 2007], dos americanos CMAQ e CAMx [Tesche *et al.*, 2006] ou do australiano TAPM [Ribeiro, 2005]. No entanto, devido à necessidade de operacionalização para previsão em tempo real e às condições específicas de zonas costeiras sujeitas a circulações de mesoscala importantes, é premente a aplicação, à escala de Portugal, de um sistema de modelos que permita simular a curto e longo prazo e com resoluções mais finas, usando como condições iniciais e fronteira as saídas de modelos de maior escala (global), quer meteorológicos, quer de qualidade do ar.

## 3.2 Descrição geral do sistema de modelos MM5-CHIMERE

O sistema de modelos seleccionado para este estudo consiste no modelo meteorológico de mesoscala MM5 do "National Center for Atmospheric Research" (NCAR) e no modelo químico de transporte multi-escala CHIMERE, desenvolvido em França através da cooperação entre o Institute Pierre-Simon Laplace (IPSL), o Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA) e o Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS).

Na Figura 3.3 é apresentado um esquema simplificado do sistema de modelos MM5-CHIMERE. Os dados de entrada necessários ao modelo químico de transporte CHIMERE compreendem informação meteorológica, dados detalhados de emissões (antropogénicas e biogénicas) e condições fronteira, para além da caracterização fisiográfica da região (topografia e uso do solo). Os resultados obtidos compreendem campos tri-dimensionais da concentração e da deposição dos vários poluentes gasosos e aerossóis simulados pelo modelo químico.

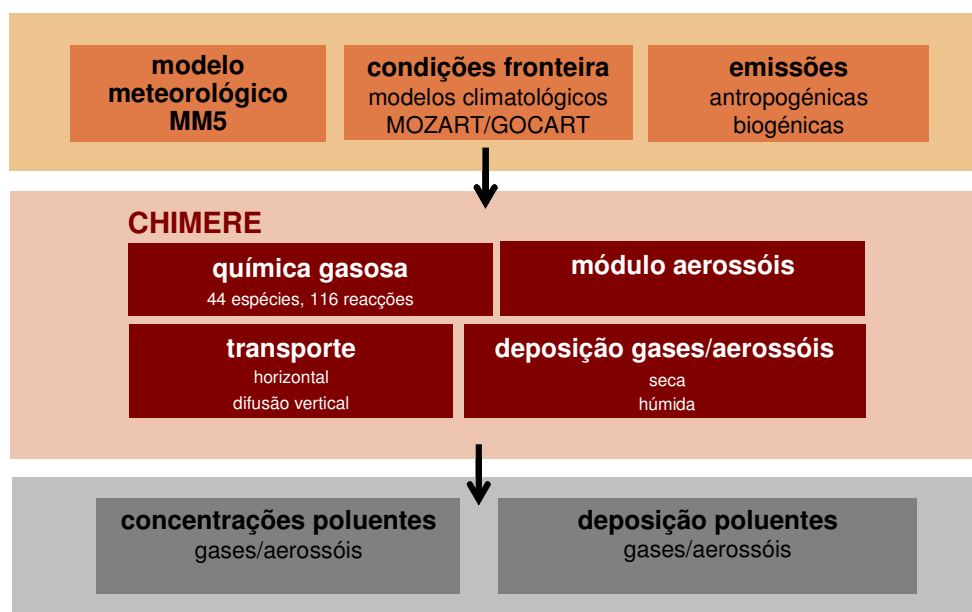


Figura 3.3. Esquema do sistema de modelos MM5-CHIMERE seleccionado para este estudo.

Os principais módulos que compõem este sistema (meteorologia, química e emissões) são descritos com, maior detalhe, de seguida.



### 3.2.1 Modelo meteorológico MM5

O modelo “Fifth Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model”, denominado MM5, é um modelo meteorológico não hidrostático, destinado a simular ou prever circulações atmosféricas à escala regional [Dudhia, 1993]. Este modelo foi desenvolvido pelo “National Center for Atmospheric Research” (NCAR), nos Estados Unidos da América, como um modelo comunitário de mesoscala, disponível à comunidade científica [NCAR, URL1]. Tem sido testado e melhorado pelos seus utilizadores, quer nas universidades, quer em laboratórios governamentais e amplamente usado para forçamento meteorológico de modelos de qualidade do ar [Jiménez *et al.*, 2006; Vautard *et al.*, 2004a; Minguzzi *et al.*, 2005; Civerolo *et al.*, 2007; entre outros].

Os melhoramentos incluídos ao longo do tempo no modelo reflectem-se, hoje em dia, na sua capacidade de executar “nesting”<sup>2</sup> múltiplos, assumindo dinâmica não hidrostática, permitindo a assimilação de dados nas 4 dimensões (x,y,z,t) e incluindo um conjunto de opções físicas de cálculo da camada limite, parametrização de cúmulos, esquemas radiativos, esquemas explícitos de humidade, entre outros.

#### 3.2.1.1 Geometria do modelo

A grelha horizontal do MM5 tem uma configuração “Arakawa-Lamb B”, onde as variáveis escalares são definidas no centro da célula da grelha, enquanto que as componentes horizontal (U) e vertical (V) do vento são localizadas nos cantos da célula. A estrutura vertical da grelha do MM5, representada na Figura 3.4, é definida em coordenadas sigma, de forma a não permitir que os níveis verticais mais baixos interseptom a topografia do terreno. A coordenada vertical sigma é dada pela expressão:

$$\sigma_i = \frac{p_i - p_t}{p_s - p_t} \quad (3.1)$$

onde  $p_t$  é a pressão de topo,  $p_s$  a pressão à superfície e  $p_i$  a pressão correspondente ao nível  $i$ . Habitualmente, a resolução na camada limite é mais fina e o número de níveis verticais varia entre 10 e 40, apesar de não existir um limite definido.

À excepção da velocidade vertical, que é definida na fronteira de cada nível vertical, as restantes variáveis são calculadas a meio de cada camada vertical, no nível “half-sigma”, representado a tracejado na Figura 3.4.

<sup>2</sup> Entende-se por “nesting” a capacidade de zooming de um modelo em termos de escala espacial, através do qual se usam os resultados da simulação de maior escala como entradas para a simulação de menor escala. Utiliza-se o termo em inglês por não existir uma expressão em Português que tenha o mesmo significado.

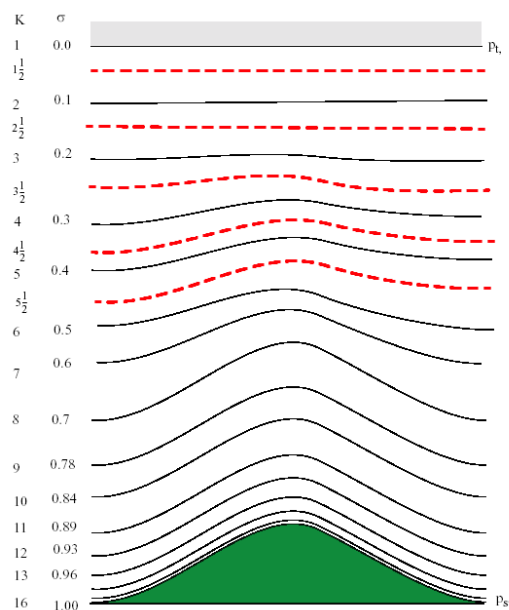


Figura 3.4. Estrutura vertical da grelha do sistema MM5. Exemplo para 15 níveis. As linhas a cheio representam os níveis sigma e a tracejado os níveis "half-sigma" [NCAR, URL1].

### 3.2.1.2 Estrutura do modelo MM5

A informação necessária para a aplicação do MM5 engloba dados de topografia e uso de solo, análise meteorológica em grelha proveniente de um modelo de escala global ou regional (vento, temperatura, humidade relativa, pressão média ao nível do mar, entre outros parâmetros) e, opcionalmente, dados meteorológicos observados (radiossondagens e dados de superfície). O modelo é constituído por vários módulos que têm como finalidade transformar dados existentes em diferentes bases (de terreno e meteorológicas de escala global) no formato requerido pelo modelo MM5. A Figura 3.5 resume de forma esquemática os módulos numéricos que constituem o sistema MM5.

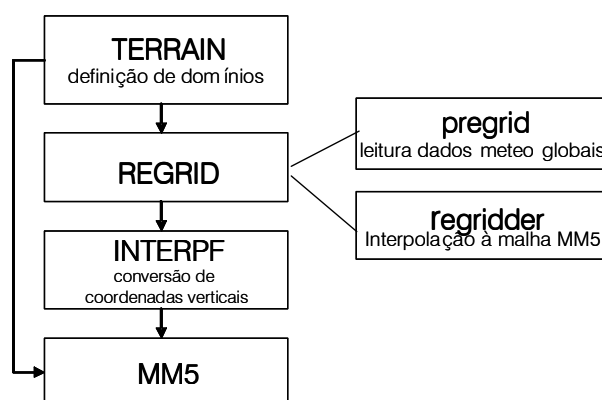


Figura 3.5. Módulos do sistema de modelação MM5.

O programa "TERRAIN" interpola horizontalmente a topografia e as classes de uso do solo, a partir de dados globais, em grelha latitude-longitude para os domínios de mesoscala seleccionados. As interpolações são efectuadas de forma sequencial, desde uma resolução de escala global (origem dos dados de entrada) até à resolução pretendida. A definição dos domínios é efectuada através da atribuição de valores aos parâmetros: coordenadas (latitude-longitude) do centro do domínio maior (domínio-mãe), posição de cada domínio no interior do seu domínio-mãe e, para cada domínio, o número de células na grelha e a dimensão da célula (resolução horizontal). Este programa também calcula alguns campos de constantes necessários para o sistema de modelação: latitude e longitude, factores de escala dos mapas associados aos domínios e parâmetro de Coriolis. A base de dados global de topografia do "United States Geological Survey" (USGS) está disponível para 6 resoluções (1°, 30', 10', 5', 2' e 30"). A selecção da resolução a utilizar depende da resolução dos domínios de mesoscala escolhidos. Relativamente ao uso do solo e vegetação, existem três tipos de bases de dados da USGS: duas de cobertura global com 13 e 25 classes para várias resoluções e uma de cobertura norte-americana. A base de dados de 25 classes foi usada na aplicação a Portugal.

O prognóstico a ser elaborado pelo módulo meteorológico tem de incluir condições iniciais e fronteira, usualmente resultantes de modelos globais. Estes dados deverão ser interpolados horizontalmente para os níveis isobáricos da grelha anteriormente calculada. Esta etapa é executada através do programa "REGRID". Neste, os dados meteorológicos globais são lidos e transformados num formato intermédio através do subprograma "pregrid".

Seguidamente, o programa "regrider" interpola para a grelha do MM5 as variáveis meteorológicas necessárias ao funcionamento do modelo MM5, segundo o método escolhido pelo utilizador, usando a informação previamente calculada pelo programa "TERRAIN". Os parâmetros meteorológicos cujos campos deverão obrigatoriamente fazer parte dos ficheiros de entrada do submódulo "regrider" são a temperatura, as componentes horizontais do vento, a humidade relativa, a altura dos níveis de pressão, a pressão ao nível do mar, a temperatura superficial do mar e, opcionalmente, os dados relativos à cobertura de neve. O facto deste módulo se apresentar dividido em duas partes torna o modelo MM5 bastante versátil em relação aos dados meteorológicos de entrada originados por modelos globais, sejam eles resultantes de modelos climáticos globais, de modelos numéricos de prognóstico ou de dados de reanálise, bastando, para tal, alterar ou substituir o programa "pregrid".

É frequente esta interpolação não fornecer o detalhe necessário, podendo os dados meteorológicos interpolados ser melhorados com observações da rede de estações superficiais e de radiossondagens.

Atendendo a que o modelo MM5 utiliza coordenadas verticais sigma, é necessário interpolar verticalmente os dados meteorológicos, fornecidos em níveis isobáricos, para o sistema de coordenadas do MM5. O programa "INTERPF" faz esta interpolação vertical, criando campos 2D e 3D para a velocidade e direcção do vento, temperatura, humidade e pressão, bem como as condições

iniciais e as condições fronteira laterais e de superfície para a inicialização da simulação meteorológica propriamente dita.

O módulo meteorológico “MM5”, módulo de modelação meteorológica propriamente dito, executa a simulação numérica. Este pode ser usado num amplo espectro de estudos teóricos e em tempo real, incluindo aplicações para previsão ou para assimilação de dados em monções, furacões e ciclones. Resolve numericamente as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e da água, fornecendo como resultados campos tridimensionais de temperatura, velocidade e direcção do vento, humidade relativa, pressão ao nível do mar e altura de geopotencial.

Possui diferentes esquemas de parametrização para o cálculo de variáveis relacionadas com processos cuja escala é inferior à resolução da malha, tais como processos da camada limite (difusão vertical), cúmulos, humidade, radiação e esquemas superficiais, como se mostra na Tabela 3.1.

Tabela 3.1. Parametrizações físicas disponíveis no modelo MM5 [NCAR, URL1].

Camada limite planetária	Nuvens	Humidade	Radiação	Superfície
1. Buld 2. High-resolution Blackadar 3. Burk-Thompson 4. Eta 5. MRF 6. Gayno-Seaman 7. Pleim-Chang	1. None 2. Anthes-Kuo 3. Grell 4. Arakawa-Schubert 5. Fritsch-Chappell 6. Kain-Fritsch 7. Betts-Miller 8. Kain-Fritsch 2	1.Dry 2.Stable Precip 3.Warm Rain 4.Simple Ice 5.Mixed-Phase 6.Goddard microphysics 7.Reisner Graupel 8.Schultz microphysics	1. Simple cooling 0 or 1. Surface radiation 2. Cloud-radiation 3. CCM2 radiation 4. Rapid Radiative Transfer Model (RRTM) longwave	0. Force/restore (Blackadar) 1. Five-Layer Soil model 2. NOAH Land-Surface Model 3. Pleim-Xiu Land-Surface Model

Os esquemas de microfísica (nuvens e humidade) parametrizam a cobertura nublosa e a precipitação à escala de resolução da simulação. Fornecem, como resultados, as tendências de temperatura, os valores de todas as variáveis relacionadas com a humidade, a quantidade de precipitação não convectiva à superfície e a informação da cobertura nublosa necessária ao esquema radiativo. Estes últimos esquemas representam os efeitos radiativos na atmosfera e à superfície da terra. O resultado do esquema aplicado irá fornecer os valores dos fluxos de radiação de pequeno e grande comprimento de onda aos esquemas de superfície que, por seu lado, determinará a temperatura do solo.

Os esquemas de opções físicas para a camada limite representam os fluxos verticais devido aos fenómenos de turbulência que ocorrem na camada limite atmosférica. Distinguem-se entre si pela forma como tratam a camada limite com características instáveis. Fornecem, como resultados, fluxos de calor, quantidade de movimento, humidade e efeitos de atrito. O seu cálculo está directamente relacionado com os resultados produzidos pelo esquema de superfície.

A escolha das parametrizações dos diferentes processos é, por vezes, dependente entre si, reflectindo a interligação que existe entre os processos, devendo também ter em atenção as características do local e do período em estudo.

O modelo MM5 permite ainda a assimilação de dados nas 4 dimensões ( $x, y, z, t$ ). Neste caso, as equações do modelo asseguram uma consistência dinâmica, enquanto a inclusão das observações mantém uma proximidade às condições reais e ajudam a colmatar erros e falhas nas análises iniciais e deficiências na física do modelo.

A capacidade de “nesting” do modelo MM5 permite refinar os resultados do domínio-mãe com base na simulação do domínio de maior resolução, podendo ser usada de duas formas: (i) apenas num sentido (“one-way nesting”), em que as condições simuladas para o domínio-mãe são utilizadas para a simulação do domínio-filho, ou (ii) em dois sentidos (“two-way nesting”) com uma troca de informação simultânea, a cada intervalo de cálculo (passo temporal), entre todos os domínios de simulação.

### 3.2.1.3 Aplicação do modelo MM5

Para além de estudos de qualidade do ar [Ferreira *et al.*, 2004; Monteiro *et al.*; 2005b Salmim, 2005], o modelo MM5 foi já validado sobre Portugal em diferentes condições sinóticas [Carvalho *et al.*, 2006; Aquilina *et al.*, 2005] e tem vindo a ser usado em diferentes domínios de estudo, tais como:

- previsão numérica do estado do tempo, pela Universidade de Lisboa [UL, URL2], pela Universidade de Aveiro [UA, URL3] e Instituto Superior Técnico [IST, URL4];
- estudos sobre o potencial eólico em Portugal, pelo Instituto Nacional de Engenharia, Tecnologia e Inovação [INETI, URL5];
- análise de padrões climáticos resultantes de alterações climáticas [Van Dijck *et al.*, 2005];
- agente forçador de modelos oceanográficos [Leitão *et al.*, 2003; Ferreira e Miranda, 2005].

No que se refere ao presente trabalho, o modelo MM5 foi aplicado, primeiro à escala europeia com uma resolução de  $54 \times 54 \text{ km}^2$  (MM5-EUR) e, de seguida, à escala regional de Portugal Continental com uma grelha de  $9 \times 9 \text{ km}^2$  de resolução (MM5-PT) (Figura 3.6).

Recorreu-se aos dados globais de reanálise e de previsão do modelo AVN do “National Centers for Environment Prediction” (NCEP), a cada seis horas, para a simulação passada e para a previsão, respectivamente. Em termos verticais foram considerados 32 níveis, desde a superfície até 100 hPa.

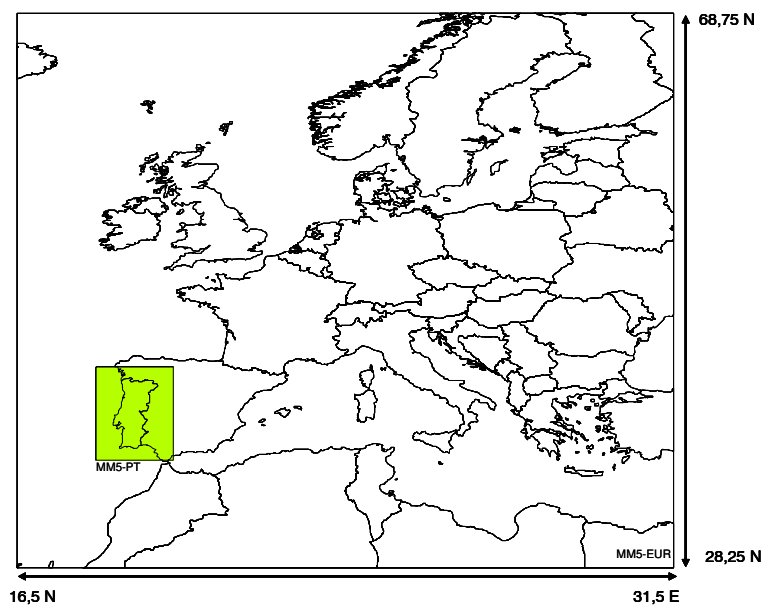


Figura 3.6. Domínios de aplicação do modelo MM5 para o caso de estudo de Portugal Continental.

Relativamente à escolha das opções físicas e parametrizações não há qualquer tipo de limitação quando se usa este modelo como forçamento meteorológico para o modelo CHIMERE. No caso particular da aplicação a Portugal Continental foram usadas as seguintes opções, justificadas pelo tipo de aplicação e resolução espacial pretendida (Tabela 3.1):

- Microfísica “Reisner Graupel” para a humidade;
- Parametrização “MRF” para a camada limite planetária;
- Parametrização “Grell” para as nuvens;
- Parametrização “RRTM” para a radiação;
- Modelo 5 camadas para a temperatura do solo.

Para que a divergência dos dados de análise iniciais seja reduzida, durante cada período de dias simulado, foi usado um coeficiente de “nudging” de  $5 \times 10^{-5}$  s, para todas as variáveis, de acordo com o valor encontrado como óptimo em simulações teste [Vautard *et al.*, 2004].

### 3.2.2 Modelo químico de transporte CHIMERE

O modelo CHIMERE foi concebido para simulações, tanto episódicas como de longo prazo, e ainda com o intuito de previsão operacional [Schmidt *et al.*, 2001; Vautard *et al.*, 2001; Bessagnet *et al.*, 2004]. Trata-se de um modelo disponível à comunidade científica com o intuito de desenvolvimentos futuros e aplicações que visem melhorar o seu desempenho. Exemplo disto é a sua presente aplicação ao domínio de Portugal Continental, para além de numerosas outras aplicações em estudos científicos [Vautard *et al.*, 2005; Szopa *et al.*, 2006; Hodzic *et al.*, 2006a, 2006b], entre as quais intercomparações com outros modelos [Ferreira *et al.*, 2003; Zhang *et al.*, 2005; Vautard *et al.*, 2007]. Tal como a maioria dos modelos químicos de transporte, o modelo CHIMERE simula os campos de concentração e deposição de poluentes, tendo por base a solução Euleriana da equação da continuidade e usando um conjunto de pré e pós-processadores de dados de entrada e saída. Em termos de funcionamento permite uma série de opções, entre as quais a escolha entre um mecanismo que contempla apenas a fase gasosa e um mais complexo que inclui a química dos aerossóis.

#### 3.2.2.1 Geometria do modelo

O modelo CHIMERE usa um sistema de grelha regular horizontal. A grelha de simulação é definida pelo utilizador e depende do domínio de estudo requerido. Não é essencial que esta grelha seja idêntica à do modelo meteorológico, efectuando-se interpolações caso seja necessário. Em termos verticais, o modelo usa um sistema de coordenadas “sigma-P”, sendo a pressão no topo de cada nível  $k$  calculada pela fórmula:

$$p_k = a_k 10^5 + b_k p_{\text{surf}} \quad (3.2)$$

Os coeficientes híbridos  $a_k$  e  $b_k$  podem ser fornecidos pelo utilizador ou definidos automaticamente, dando a pressão no topo e o valor de “sigma” no topo da camada superficial e variando a resolução vertical segundo uma progressão geométrica. O modelo possui ainda a opção de usar técnicas simples de “nesting”, fornecendo condições fronteira mais correctas à escala de estudo, a partir de uma simulação a uma escala mais grosseira.

No caso de Portugal Continental, o modelo CHIMERE foi aplicado, numa primeira fase, à escala europeia com uma resolução de grelha de  $50 \times 50 \text{ km}^2$  (CHIM-EUR), simulando depois, através da técnica de “nesting”, o domínio de Portugal Continental (Figura 3.7) de dimensões  $290 \text{ km} \times 580 \text{ km}$ , e com uma resolução horizontal de  $10 \times 10 \text{ km}^2$  (CHIM-PT). Esta resolução resulta do melhor compromisso entre o detalhe requerido pela escala regional e o tempo computacional exigido. Em termos verticais, este último domínio tem uma extensão de 3000 m, distribuída por 8 níveis de

espaçamento desigual, mais refinada junto ao solo e progressivamente mais afastada em altitude (desde dos 20 aos 3000 metros).

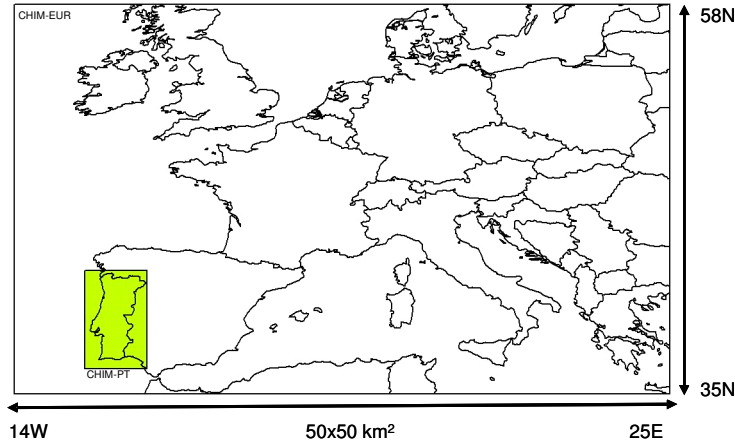


Figura 3.7. Domínios de aplicação do modelo CHIMERE ao caso de estudo de Portugal Continental.

### 3.2.2.2 Meteorologia

Os dados meteorológicos requeridos pelo modelo CHIMERE incluem variáveis 3D e 2D e estão resumidos na Tabela 3.2, de acordo com o objectivo a que se destinam. Estes valores são interpolados na horizontal, na vertical e temporalmente, através de pré-processadores, de forma a serem usados na grelha de simulação definida para o modelo químico.

Tabela 3.2. Variáveis de saída do modelo MM5 necessárias para o modelo químico CHIMERE.

<b>Variáveis 3D</b>	<b>Objectivo</b>
Vento horizontal	transporte
Temperatura	química e termodinâmica
Massa volúmica	química e transporte
Humidade específica	química e termodinâmica
Altura dos níveis verticais	geometria do modelo
Fracção de água líquida nas nuvens	química fase aquosa e "scavenging" <sup>3</sup> de aerossóis
<b>Variáveis 2D</b>	<b>Objectivo</b>
Temperatura a 2 metros	deposição, emissões biogénicas
Atenuação da radiação (albedo)	química/fotólise
Velocidade de atrito	processos de mistura
Altura da camada de mistura	processos de mistura e deposição
Comprimento de Monin-Obukhov	processos de mistura
Velocidade convectiva	processos de mistura
Resistência aerodinâmica	deposição
Taxa de precipitação total	"scavenging" de aerossóis

<sup>3</sup> Entende-se por "scavenging" a remoção de aerossóis pelas gotas de chuva, dependente da taxa de precipitação e da eficiência de colisão entre as gotas e as partículas de aerossóis. Utiliza-se o termo em inglês por não existir uma expressão em Português com este significado.



### 3.2.2.3 Condições iniciais e fronteira

As condições fronteira (de topo e laterais) podem ser fornecidas externamente ou através de uma simulação de grande escala (baixa resolução), recorrendo à técnica de “nesting”. Na primeira opção são vulgarmente obtidas a partir de médias mensais de modelos climatológicos, como é o caso do modelo químico de transporte global MOZART [Horowitz *et al.*, 2003] para as espécies gasosas e do modelo global GOCART [Ginoux *et al.*, 2001] para os aerossóis. Relativamente às condições iniciais, há duas formas possíveis de inicialização do modelo: através da leitura de concentrações iniciais gravadas, resultantes da simulação do período anterior (preferencial e usada na presente aplicação), ou da interpolação das condições fronteira, efectuada sempre que não existe (ou não é fornecida) informação com as concentrações iniciais.

### 3.2.2.4 Topografia e uso do solo

A topografia é fornecida pelo modelo meteorológico, neste caso o modelo MM5, através de um pré-processador. Relativamente ao uso do solo, o modelo CHIMERE utiliza, por defeito, a base de dados “Global Land Cover Facility” (GLCF) da Universidade de Maryland [GLCF, URL6] com 1 x 1 km<sup>2</sup> de resolução e constituída por 14 classes, posteriormente agrupadas num conjunto de 9 categorias usadas pelo CHIMERE, de acordo com o apresentado na Tabela 3.3.

Tabela 3.3. Categorias de uso do solo usadas pelo modelo CHIMERE e correspondência com a GLCF.

Número categoria	Descrição	Correspondência GLCF (0-13)
1	Agricultura	[11]
2	Pastos	[10]+1/2([7])
3	Vegetação rasteira	[12]
4	Lagos e rios	[0]
5	Urbano	[13]
6	Arbustos	[8]+[9]
7	Floresta de folha fina (pinheiros, eucalipto)	[1]+[3]+1/2([5]+[6])+1/4[7]
8	Floresta de folha larga (sobreiro)	[2]+[4]+1/2([5]+[6])+1/4[7]
9	Oceano	[0]

### 3.2.2.5 Processos de transporte e mistura

#### *Transporte horizontal*

O transporte horizontal é obtido calculando os fluxos de poluentes na fronteira de cada célula da grelha do modelo. Seja  $C_{ij}$  a concentração de um dado poluente no centro da célula  $i,j$ , e  $U_{ij}$  e  $V_{ij}$  as componentes do vento (zonal e meridional). O escoamento atmosférico é calculado para cada uma das 4 fronteiras da célula, tendo em atenção apenas a componente normal do vento e fazendo a média desta componente entre a célula  $i,j$  e a sua adjacente  $(i-1,j)$ . A componente normal do vento resultante é então:

$$U = 1/2(U_{ij} + U_{i-1,j}) \quad (3.3)$$

e a espessura da interface:

$$H = 1/2(H_{ij} + H_{i-1,j}) \quad (3.4)$$

o fluxo F pode ser calculado como:

$$F = U \frac{H}{H_{ij}} \frac{C}{L_{ij}} \quad (3.5)$$

sendo  $L_{ij}$  a extensão zonal da célula. A concentração C é calculada, dependendo do poluente, pelo método "UPWIND" (usando  $C = C_{i-1,j}$  quando  $U > 0$  e  $C = C_{ij}$  quando  $U < 0$ ) ou pelo método "Parabolic Piecewise Method" (PPM) [Colella e Woodward, 1984]. Este último método é apenas usado para um número pequeno de espécies dado o elevado tempo computacional requerido. Dado que a maior parte dos modelos meteorológicos não inclui nenhum tipo de parametrização urbana, um dos últimos desenvolvimentos efectuado no modelo CHIMERE foi a introdução da possibilidade de corrigir a velocidade do vento na camada superficial de uma cidade devido ao aumento de rugosidade numa área urbana. Verificou-se que esta alteração tem apenas efeitos notórios em simulações à escala urbana (resoluções < 5 km) e principalmente nas concentrações de poluentes primários [Vautard *et al.*, 2001].

#### *Transporte vertical*

Assume-se que o transporte vertical equilibra a divergência/convergência horizontal mássica, usando o fecho de primeira-ordem "UPWIND" [Schmidt *et al.*, 2001].

#### *Mistura turbulenta*

Não são considerados fluxos turbulentos horizontais e assume-se que a mistura turbulenta vertical ocorre apenas na camada de mistura. Na formulação usa-se a difusão K segundo a parametrização de Troen e Mahrt [1986], sem o termo de "counter-gradient". Em cada coluna vertical do modelo, a difusividade  $K_z$  é calculada de acordo com:

$$K_z = k w_s z \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1/3} \quad (3.6)$$

onde h é a altura de camada de mistura (que pode ser fornecida pelo modelo meteorológico ou calculada pelo modelo químico com base no número de Richardson) e  $w_s$  é a escala vertical dada pela teoria da semelhança:

- no caso de estabilidade (fluxo superficial de calor sensível < 0):  $w_s = u_* / (1 + 4,7z/L)$
- no caso de instabilidade:  $w_s = (u_*^3 + 2,8e w_*^3)^{1/3}$

onde  $u_*$  é a velocidade tangencial,  $e = \max(0, 1 - z/h)$ , L é o comprimento de Obukhov e  $w_*$  a velocidade convectiva. Em cada interface entre os níveis k e k+1, é calculada uma velocidade vertical turbulenta equivalente ( $V_k$ ) e a mistura vertical é expressa no nível k pelo fluxo mássico:

$$\text{Fluxo mássico} = V_k (C_{k+1} M_k / M_{k+1} - C_k) / H_k \quad (3.7)$$

onde  $M$  significa massa volúmica e  $H$  a espessura da camada. Usam-se razões de massa volúmica porque existe conservação da massa em cada célula do modelo. A velocidade turbulenta  $V_k$  pode ser deduzida através de  $K_z$  usando:

$$V_k = \frac{K_z}{(0.5(H_k + H_{k+1}))} \quad (3.8)$$

Os fluxos turbulentos, assim como os anteriores fluxos mássicos horizontais e verticais, são calculados primeiro em cada grande intervalo de tempo e depois, em cada intervalo de tempo pequeno é feito o seu cálculo completo.

### 3.2.2.6 Mecanismo químico (para gases)

O modelo CHIMERE permite optar entre diferentes mecanismos químicos para a fase gasosa. O mecanismo original completo, denominado MELCHIOR1 [Lattuati, 1997], é descrito por mais de 300 reacções e cerca de 80 espécies. A degradação dos hidrocarbonetos é similar à do mecanismo do modelo EMEP [Simpson, 1992], com algumas adaptações para baixas concentrações de  $\text{NO}_x$  e para a química do  $\text{NO}_x$ -nitrato. Todas as constantes químicas foram actualizadas de acordo com Atkinson *et al.* [1997] e De Moore *et al.* [1994]. A formação de HONO a partir da deposição de  $\text{NO}_2$  é considerada através da formulação de Aumont *et al.* [2003]. As taxas de fotólise são calculadas para condições de céu limpo como função da altura usando o modelo TUV [Madronich *et al.*, 1998]. Os compostos orgânicos não metânicos (COVNM) são diferenciados em 227 espécies individuais de acordo com a especiação inglesa [Passant, 2002].

De modo a reduzir o tempo computacional, foi criado, a partir do esquema MELCHIOR1, um novo mecanismo mais simples (MELCHIOR2), com 44 espécies e cerca de 120 reacções, seguindo o conceito de “operadores químicos” [Carter, 1990]. Dado que foi esta a versão do mecanismo usada nas aplicações deste trabalho, apresenta-se, no Anexo II, a lista de reacções incluídas neste mecanismo reduzido.

### 3.2.2.7 Mecanismo químico (aerossóis)

A versão do modelo CHIMERE aplicada neste trabalho integra um módulo específico para aerossóis, que inclui 6 espécies: material particulado primário (espécies primárias antropogénicas como carbono elementar, orgânico e matéria mineral), nitratos, sulfatos, amónia, aerossol orgânico secundário (SOA<sup>4</sup>) e água. No Anexo II apresenta-se a listagem das espécies simuladas por esta versão do modelo. Uma descrição mais pormenorizada deste módulo pode ser encontrada em Bessagnet *et al.* [2004] e Hodzic *et al.* [2005]. A população de partículas de aerossóis é representada por uma formulação sectorial, que assume uma distribuição discreta em 6 tamanhos de diâmetro (desde 10

<sup>4</sup> do inglês “Secondary Organic Aerosol”

nm a 40  $\mu\text{m}$ ) e considera as partículas com a mesma secção totalmente misturadas. As partículas novas são formadas por nucleação do  $\text{H}_2\text{SO}_4$  [Kulmala *et al.*, 1998] e crescem devido a processos de coagulação [Gelbard e Seinfeld, 1980] e condensação de espécies semi-voláteis. Consideram-se também processos de absorção, tanto para espécies orgânicas como inorgânicas, apesar de serem fenómenos físicos diferentes. Para as espécies inorgânicas, as concentrações de equilíbrio são calculadas através do modelo termodinâmico ISORROPIA [Nenes *et al.*, 1998], enquanto para as espécies orgânicas secundárias as mesmas concentrações são calculadas através do coeficiente de partição, dependente da temperatura [Pankow, 1994].

Em termos de reacções químicas, quando é incluído o módulo de aerossóis, são consideradas uma série de transformações químicas e adicionadas ao mecanismo químico MELCHIOR2. Os sulfatos são produzidos tendo em conta as seguintes reacções químicas em fase aquosa [Berge, 1993]:



Para além disso, são consideradas algumas reacções heterogéneas. Apesar das partículas de aerossóis e nuvens constituírem uma fracção muito pequena da atmosfera, verificou-se que as reacções de espécies gasosas que ocorrem nas suas superfícies podem ser particularmente importantes para a química de alguns poluentes gasosos. Estudos recentes recomendaram a inclusão do seguinte conjunto de reacções para a simulação do ozono [Jacob, 2000]:



Enquanto a química inorgânica dos aerossóis está já relativamente bem investigada, a composição e os processos de formação da fracção orgânica ainda estão em processo de estudo, devido à sua elevada complexidade e envolvimento de centenas de espécies diferentes que dificultam a sua caracterização pelos métodos analíticos correntes [Pio *et al.*, 2007; Pun *et al.*, 2007]. É também por este último motivo que alguns modelos de qualidade do ar têm vindo a ser desenvolvidos de forma a incorporar a complexa química da parte orgânica do aerossol atmosférico, possibilitando assim a sua avaliação e a definição de estratégias de redução custo-eficazes. O modelo CHIMERE é um destes exemplos, onde a química orgânica do aerossol atmosférico foi incorporada no mecanismo MELCHIOR através de um esquema simplificado. A formação de aerossóis orgânicos secundários

antropogénicos (ASOA<sup>5</sup>) é obtida de vários autores [Grosjean e Seinfeld, 1989; Odum *et al.*, 1997], enquanto os de origem biogénica (BSOA<sup>6</sup>) são originados pela oxidação dos terpenos [Pankow *et al.*, 2001]. Por outro lado, alguns compostos orgânicos voláteis (alcanos, aromáticos e monoterpenos) são considerados, no modelo, precursores de SOA. Assim sendo, tanto ASOA como BSOA, existem entre a fase gasosa e a fase particulada e, como tal, a transferência de massa não é apenas dependente da difusão na fase gasosa mas também do equilíbrio termodinâmico [Pankow, 1994].

### 3.2.2.8 Cobertura nublosa e atenuação das taxas fotólise

Assume-se que a cobertura nublosa se encontra acima do topo do domínio, não existindo, como tal, efeito albedo dentro do domínio simulado. Apenas as taxas de fotólise são multiplicadas para cada coluna da grelha do modelo por um coeficiente de atenuação  $A(d)$ , que depende da espessura óptica total da cobertura de nuvens ( $d$ ), pela fórmula:

$$A(d) = e^{-0,11d^{2/3}} \quad (3.11)$$

O cálculo de  $d$  pode ser feito de diversas formas, com três opções à escolha no modelo: (i) como função da fracção de água/gelo existente na coluna; (ii) usando parametrizações com base na humidade relativa; ou (iii) considerando  $d$  proporcional à fracção da cobertura nublosa (dada pelo modelo meteorológico e usada na presente aplicação).

### 3.2.2.9 Deposição seca e húmida

A remoção dos poluentes gasosos ou aerossóis pode ocorrer por deposição seca ou húmida. Relativamente aos gases, a deposição seca é parametrizada no modelo como um fluxo descendente, calculado a partir da velocidade de deposição do poluente  $i$  que é descrita, como usualmente, através de uma analogia de resistências [Wesely, 1989]:

$$v_{d,i} = \frac{1}{R_a + R_{b,i} + R_{c,i}} \quad (3.12)$$

$R_a$  representa a resistência aerodinâmica,  $R_{b,i}$  a resistência da camada quasi-laminar e  $R_{c,i}$  a resistência superficial. Em relação aos aerossóis, também é usado um esquema de resistências, mas a velocidade de deposição é função da velocidade de sedimentação ( $v_s$ ) [Seinfeld e Pandis, 1998].

$$v_d = v_s + \frac{1}{R_a + R_b + R_s R_b v_s} \quad (3.13)$$

A remoção dos poluentes pela via húmida pode dar-se nas nuvens ou através das gotas da chuva. No caso dos gases, é assumida para alguns tipos de poluentes uma dissolução irreversível pelas gotas da chuva (por exemplo  $\text{HNO}_3$  e  $\text{NH}_3$ ), enquanto que nas nuvens há que ter em conta o equilíbrio entre a concentração do gás dissolvido e na fase gasosa [Seinfeld e Pandis, 1998]. No caso das partículas,

<sup>5</sup> do inglês "Anthropogenic Secondary Organic Aerosol"

<sup>6</sup> do inglês "Biogenic Secondary Organic Aerosol"

pode haver remoção por coagulação (nuvens) ou por precipitação (gotas de chuva), sendo ainda possível a formação de novas gotas por nucleação. Em ambos os casos a estimativa baseia-se no cálculo de fluxos de deposição [Guelle *et al.*, 1998; Loosmore e Cederwall, 2004]. A erosão é considerada pelo modelo através da formulação de Vautard *et al.* [2004b]. Os processos de ressuspensão não foram incluídos devido à elevada incerteza que lhes está associada [Ketzel *et al.*, 2006].

### 3.2.2.10 . Algoritmo numérico

O método numérico usado para resolver temporalmente o sistema de equações diferenciais parciais é adaptado do algoritmo de segunda-ordem “TWOSTEP”, originalmente proposto por Verwer [1994] para a química da fase gasosa. A Figura 3.8 esquematiza as diferenças existentes entre a clássica técnica de “operator splitting” para resolução de um problema 3D de transporte químico, com o associado “splitting-error”, e a sua adaptação no modelo CHIMERE, onde, em cada intervalo de tempo, todos os processos físicos e químicos são actualizados/calculados simultaneamente. Esta adaptação permite ainda obter uma maior estabilidade para intervalos de tempo mais longos, a qual facilita o desenvolvimento e introdução de modelos secundários.

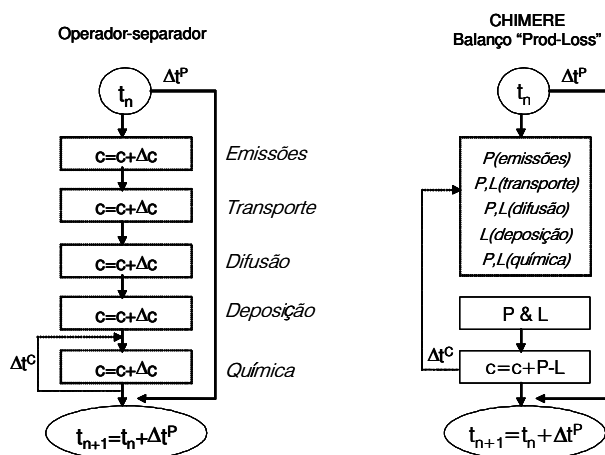


Figura 3.8. Princípio do “operator-separador” *versus* a sua adaptação no modelo CHIMERE.

Na prática, o intervalo de cálculo tem dois intervalos de tempo: um inicial grosseiro, onde todas as variáveis físicas são calculadas e um outro, mais pequeno (refinado), com vista a obter maior precisão na química. Nas aplicações do modelo ao domínio de Portugal Continental foi considerado um intervalo de tempo de 10 minutos e apenas 1 iteração pelo método iterativo de Gauss-Seidel, de forma a não comprometer demasiado o tempo de cálculo exigido, dado que se trata de simulações de longo prazo ou de previsão em tempo real.

### 3.2.3 Emissões

A inventariação de emissões atmosféricas é uma componente fundamental para a modelação física e química da atmosfera. Para além de possibilitar a identificação de fontes e actividades poluidoras, constitui um apoio para a definição de medidas mitigadoras e a gestão da qualidade do ar. Ao contrário do que seria desejável, só se encontra disponível um reduzido número de emissões monitorizadas, o que exige o recurso a aproximações que permitam ultrapassar as lacunas de informação existentes. Recorre-se vulgarmente a factores de emissão, aplicados a valores representativos da actividade das fontes poluentes e relacionados linearmente com a sua capacidade poluidora (nível de actividade):

$$\text{Emissão} = [\text{Factor de emissão}] \times [\text{Nível de actividade}] \quad (3.14)$$

A simplicidade desta expressão esconde a complexidade associada à sua aplicação, quer no que diz respeito aos factores de emissão necessários para cada tipo de fonte, quer à obtenção de níveis de actividade adequados, em particular para resoluções espaço-temporais finas. Por esta razão, a desagregação dos valores disponíveis, mediante aproximações empíricas, constitui procedimento corrente [Monteiro *et al.*, 2001]. Existem, no entanto, diversos modelos de emissões que permitem estimar os valores de emissão para várias actividades poluidoras, como o tráfego e a actividade biogénica [Geron *et al.*, 1994; Tchepel, 2003; Parra *et al.*, 2006]. A metodologia CORINAIR, adoptada pelo programa EMEP (Co-operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-range Transmission of Air Pollutants in Europe) [EMEP, URL7; EEA, 2006], procurou harmonizar a inventariação das emissões atmosféricas através da definição de categorias de poluentes e fontes poluidoras, juntamente com procedimentos de validação e verificação. Os inventários actualmente disponíveis são elaborados segundo esta metodologia, e agrupam as fontes poluidoras em 11 categorias (SNAP):

- SNAP1: Produção de energia;
- SNAP2: Combustão residencial e comercial;
- SNAP3: Combustão industrial;
- SNAP4: Processos de produção;
- SNAP5: Extração e distribuição de combustíveis;
- SNAP6: Evaporação de solventes;
- SNAP7: Transportes rodoviários;
- SNAP8: Outras fontes móveis;
- SNAP9: Tratamento e deposição de resíduos;
- SNAP10 e 11: Agricultura e Natureza (biogénicas).

Esta metodologia classifica ainda as fontes poluidoras em: grandes fontes emissoras (instalações industriais com níveis de produção elevados, como são exemplos as centrais térmicas; celulosas;

cimenteiras, entre outras) e fontes em área (actividades poluidoras de carácter difuso). Os poluentes considerados incluem os gases com efeito de estufa, acidificantes e material particulado:  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ , COVNM,  $\text{CH}_4$ , CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{PM}_{10}$ . No caso das grandes fontes emissoras industriais, onde são exigidas monitorizações periódicas das emissões [Santos, 2006], foi possível incorporar estes dados medidos no inventário, caso contrário seria necessário recorrer à caracterização do processo emissor e à aplicação de factores de emissão. A Figura 3.9 apresenta o número total (32) e a distribuição geográfica destas grandes fontes emissoras industriais existentes em Portugal e consideradas na simulação numérica.

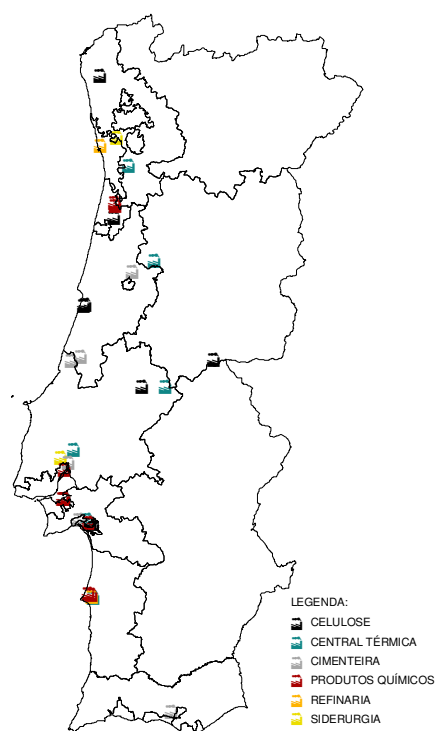


Figura 3.9. Grandes fontes emissoras industriais existentes em Portugal.

Relativamente às fontes em área, a sua inventariação é mais complexa, sendo, geralmente, usadas duas metodologias para a estimativa destas emissões [Borrego *et al.*, 2002b]:

- "top-down": onde é realizado o cálculo das emissões em termos globais de uma determinada região para a qual existem dados disponíveis e, numa segunda fase, é feita a desagregação espacial e/ou temporal para escalas mais baixas, a partir de factores de ponderação adaptados ao tipo de fonte poluente em análise;
- "bottom-up": onde a estimativa das emissões é feita para uma área geográfica bem caracterizada, sendo conhecidos todos os dados necessários ao seu cálculo. Esta abordagem é bastante precisa, mas pressupõe a disponibilidade de toda a informação necessária de uma forma detalhada, o que nem sempre é possível.



### 3.2.3.1 Biogénicas

Emissões biogénicas de isopreno e terpenos (considerados como  $\alpha$ -pinenos no mecanismo químico) são parametrizadas como fluxos que dependem do potencial de emissão, da densidade folhosa [Gunther, 1997], da temperatura e insolação. A cobertura espacial da vegetação é obtida a partir de Simpson *et al.* [1999], com 136 tipos de árvores (agregadas em 11 classes emissoras) e posteriormente interpolada para a grelha de simulação. Para além destas, são consideradas as emissões biogénicas associadas aos solos fertilizados, estimadas com base na metodologia proposta por Stohl *et al.* [1996].

### 3.2.3.2 Antropogénicas

Ao abrigo dos compromissos internacionais e com a União Europeia, a APA elabora anualmente um Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas (INERPA) para gases acidificantes, eutrofizantes, precursores de ozono, partículas e metais pesados, de acordo com a metodologia CORINAIR, adoptada como referência. Neste âmbito, Portugal deve preparar, para cada ano, a espacialização do inventário no âmbito da Convenção sobre Poluição Atmosférica Transfronteiriça a Longa Distância (CLTRAP), com uma resolução espacial limitada à grelha EMEP (50 x 50 km<sup>2</sup>), mas cujos dados de base apresentam um maior nível de detalhe, ao nível do concelho [IA, 2005b]. Este inventário nacional foi desenvolvido segundo uma abordagem “top-down”, usando, para cada actividade poluente, indicadores sócio-económicos próprios para a desagregação de cada umas das actividades (consumo combustível, população, área agrícola, etc.). Há, no entanto, a excepção do tráfego rodoviário, para o qual se recorreu a dois tipos de aproximação: uma metodologia “bottom-up” para as emissões das auto-estradas e uma metodologia “top-down” para as restantes emissões, calculadas de acordo com o tipo de freguesia (urbana ou rural) [IA, 2005b]. Os dados de emissões deste inventário são considerados como oficiais e são usados para verificar o cumprimento das obrigações internacionais no âmbito da Directiva Comunitária dos Tectos de Emissões e da CLTRAP.

Relativamente aos dados de emissões para a aplicação neste trabalho, foi usado, na simulação à escala europeia (Figura 3.7), o inventário de emissões do programa EMEP disponível para cada ano, e com resolução idêntica à da simulação numérica (50 x 50 km<sup>2</sup>). Para o domínio de Portugal Continental, recorreu-se ao Inventário Nacional INERPA, acima referido. Este inventário foi ainda desagregado espacialmente e temporalmente, para cada actividade poluente, de acordo com dados estatísticos sócio-económicos disponíveis. Em termos espaciais, a desagregação foi executada até ao nível da freguesia, recorrendo aos dados da população dos Censos 2001 [Monteiro *et al.*, 2001]. Para a desagregação temporal recorreu-se a perfis medidos experimentalmente para o tráfego [Monteiro *et al.*, 2007a] e perfis europeus típicos mensais, semanais e diários, definidos no projecto GENEMIS [1994], para as restantes actividades.

A título de exemplo, apresenta-se o resultado deste inventário desagregado espacialmente para o ano 2001, para a matéria particulada proveniente do tráfego rodoviário (Figura 3.10) e para os precursores de ozono ( $\text{NO}_x$  e COVNM) libertados pelas restantes actividades (Figura 3.11).

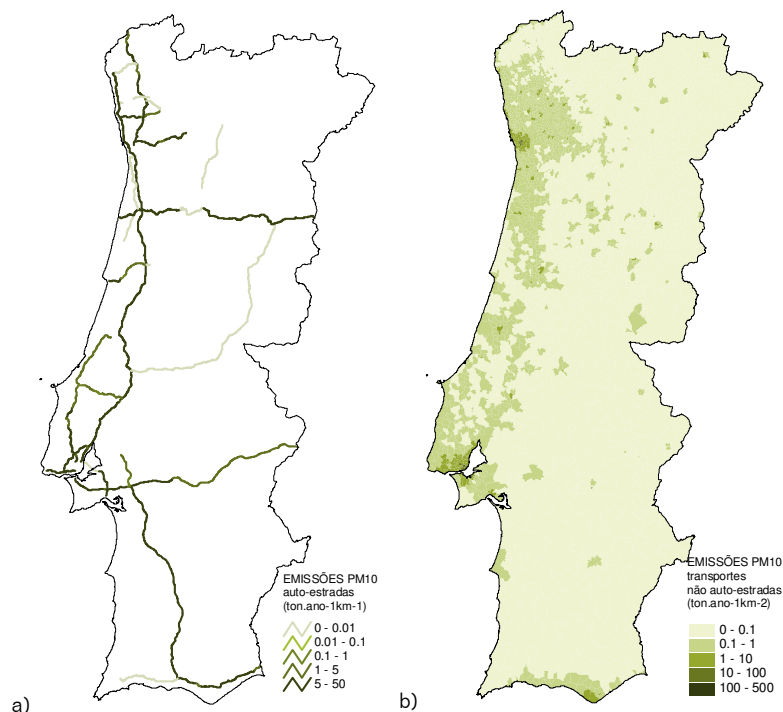


Figura 3.10. Emissões de  $\text{PM}_{10}$  provenientes das (a) autoestradas (metodologia "bottom-up") e (b) restantes estradas urbanas e rurais (metodologia "top-down").

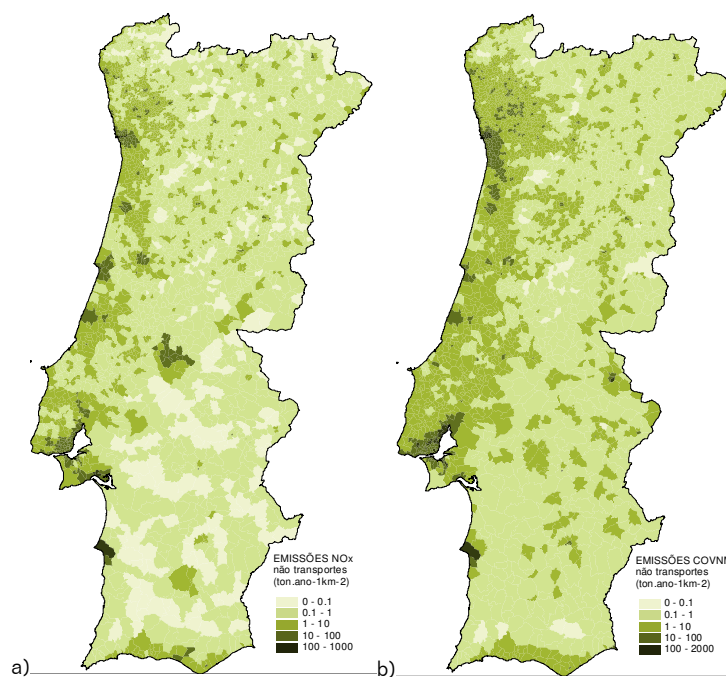


Figura 3.11. Emissões de (a)  $\text{NO}_x$  e (b) COVNM provenientes de todas as actividades antropogénicas, com excepção dos transportes rodoviários.

A actualização anual do inventário nacional permite efectuar uma análise comparativa da evolução das emissões em Portugal, quer em termos de poluentes, quer por actividade emissora. Na Figura 3.12 apresenta-se uma comparação entre o inventário total nacional, por poluente, desenvolvido para os anos 2001, 2002 e 2003 (relativos às últimas actualizações do inventário).

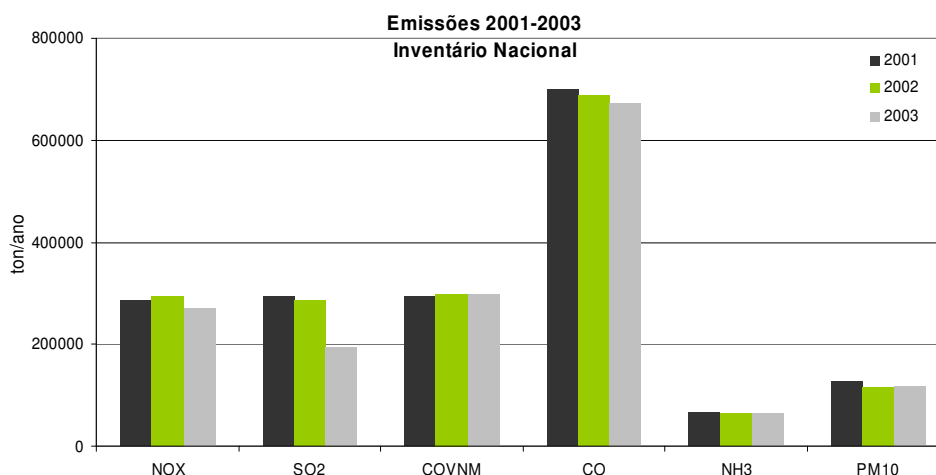


Figura 3.12. Comparação entre as emissões antropogénicas totais estimadas para 2001, 2002 e 2003.

Verifica-se que existe, entre 2001 e 2003, uma acentuada diminuição de  $\text{SO}_2$  devido sobretudo à redução das emissões provenientes do sector da combustão industrial, incluindo centrais térmicas (ver Anexo III). A redução, também, verificada nas emissões totais de  $\text{PM}_{10}$ , CO e  $\text{NO}_x$  é justificada por tecnologias mais limpas e alterações no uso de combustível, quer ao nível dos transportes, quer da combustão industrial [IA, 2002a]. Não se registam variações significativas no que diz respeito às emissões de  $\text{NH}_3$  e de compostos orgânicos voláteis.

### 3.2.3.3 Avaliação do inventário de emissões antropogénicas

Dado que as emissões são reconhecidas como uma das maiores fontes de incerteza no processo de modelação da qualidade do ar [Hanna *et al.*, 2001b], torna-se imprescindível e fundamental estimar o grau de precisão associado a um dado inventário.

Visando avaliar e validar o inventário nacional de emissões e assumindo que os modelos de qualidade do ar podem ajudar a diagnosticar as incertezas das emissões, foram realizados testes de sensibilidade com o sistema de modelação seleccionado para o presente estudo, testando diferentes abordagens de desagregação espaço-temporal e comparando-o com dois outros inventários disponíveis (com diferente resolução espacial) para o domínio de Portugal Continental. Estes inventários provêm dos modelos de emissões EMEP [Vestreng *et al.*, 2005] e LOTOS [Visschedijk e Denier Van Der Gon, 2005].

A grelha de emissões EMEP (50 x 50 km<sup>2</sup>) foi obtida directamente da base de dados interactiva disponível na Internet, baseada no modelo EMEP, mas com algumas correcções/substituições feitas de acordo com os dados oficiais reportados por cada Estado-Membro [EMEP, URL7].

Por sua vez, o inventário de emissões LOTOS tem como base a grelha de emissões do “Institute of Environmental Sciences, Energy Research and Process Innovation” (TNO), de resolução 0,25°x0,125° longitude-latidade (≈ 12 x 12 km<sup>2</sup>), ajustadas para os totais estimados pelo programa CAFE para 2000.

Na Figura 3.13a apresenta-se a comparação entre as emissões antropogénicas totais, por poluente, estimadas para Portugal, pelos 3 inventários, para o ano 2003. Nesta comparação, é notória a subestimativa das emissões totais (20-30%) por parte do inventário LOTOS, principalmente no que se refere às emissões de matéria particulada (50%). Consta-se também, na Figura 3.13b, que é no sector dos transportes rodoviários que se registam as maiores diferenças entre os inventários.

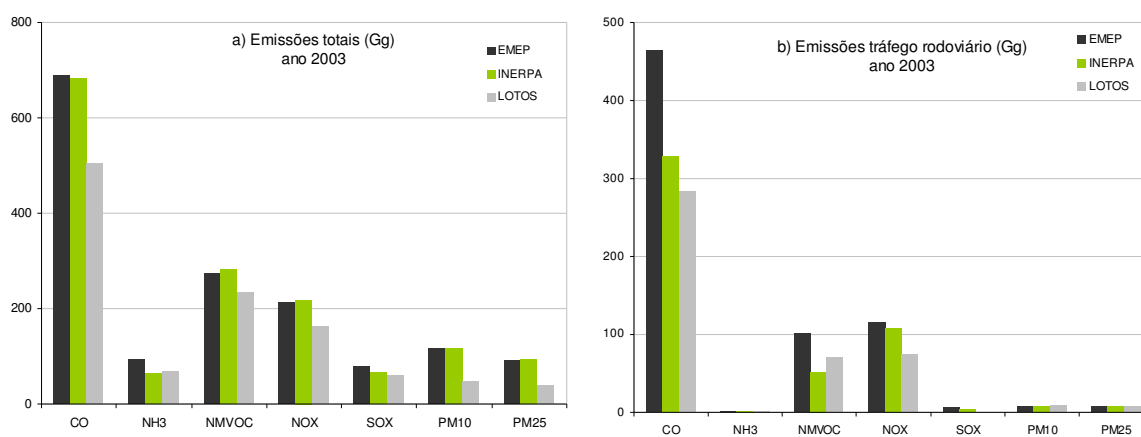


Figura 3.13. Comparação entre (a) o total de emissões e (b) as do transporte rodoviário para cada inventário, por espécie poluente.

As simulações teste foram efectuadas para o Verão de 2004, reportando os inventários ao ano 2003, correspondente à última actualização disponível.

Começou por se avaliar o nível de desagregação espacial do inventário de emissões nacional (INERPA), comparando os resultados da modelação obtidos com o inventário nacional originalmente concebido (ao nível do concelho) com a sua posterior desagregação até ao nível da freguesia, realizada com base nos dados de população residente dos Census 2001. A Figura 3.14 mostra o resultado desta desagregação relativamente às emissões de NO<sub>x</sub> provenientes do tráfego rodoviário.

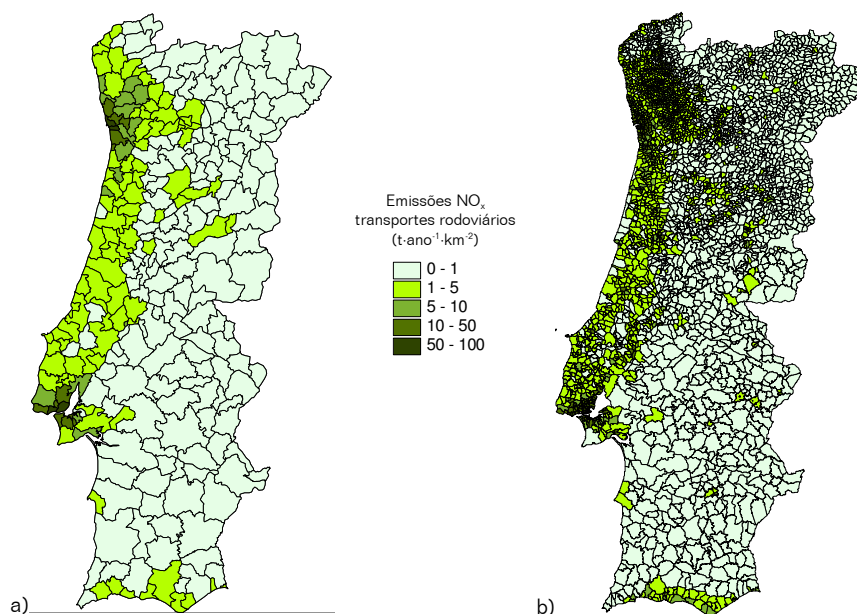


Figura 3.14. Distribuição espacial das emissões de  $\text{NO}_x$  (ano 2003) provenientes do tráfego rodoviário para uma (a) desagregação por concelho e (b) por freguesia.

A comparação entre os valores observados nas redes regionais de monitorização da qualidade do ar (Figura 2.3 e Figura 2.4) e os modelados revela que existe um pior desempenho do modelo, em termos de ozono, quando é usado o nível de desagregação superior (por freguesia) das emissões, especialmente nas áreas urbanas. Isso é comprovado pela análise do erro quadrático médio<sup>7</sup>, por tipo de estação, apresentada na Figura 3.15.

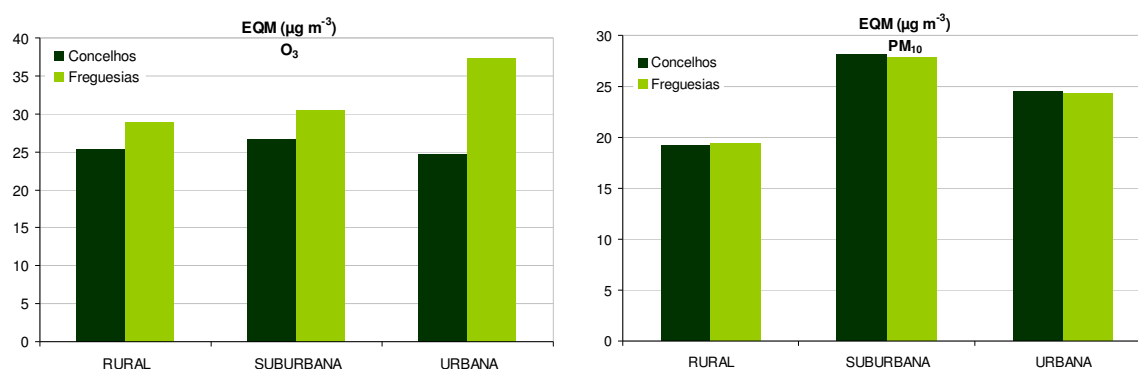


Figura 3.15. Comparação entre o Erro Quadrático Médio (EQM) obtido entre as duas simulações, para  $\text{O}_3$  e  $\text{PM}_{10}$ , considerando a média para os vários tipos de estações de fundo (rural, suburbano e urbano).

<sup>7</sup> O erro quadrático médio (EQM) é dado por:

$$\text{EQM} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N (\text{O}_i - \text{M}_i)^2}$$

onde  $\text{O}_i$ : concentração observada na hora  $i$ ;  $\text{M}_i$ : concentração modelada na hora  $i$ ;  $N$ : número de pares de amostras

As diferenças não são significativas para  $PM_{10}$ , o que poderá indicar que a desagregação espacial realizada por população residente será mais correcta para o caso deste poluente primário, e menos para os poluentes precursores de  $O_3$ , emitidos maioritariamente pelos transportes rodoviários (ver Anexo III). Estes resultados sugerem que a desagregação de um inventário de emissões deve ser realizada apenas quando existem indicadores apropriados (neste caso seriam precisos dados de mobilidade da população), caso contrário, poderá ser maior a incerteza introduzida nos dados de emissões. Por este motivo, optou-se por usar o inventário de emissões por concelho, originalmente obtido, nas aplicações do modelo a Portugal.

Relativamente aos testes dos 3 inventários, as matrizes de emissões foram convertidas recorrendo a um Sistema de Informação Geográfica (SIG) e ao método “Kriging” para a interpolação para a grelha regular de resolução  $10 \times 10 \text{ km}^2$ , de acordo com o usado na simulação numérica. A Figura 3.16 mostra o resultado do processo de interpolação para os 3 inventários, no caso das  $PM_{10}$ .

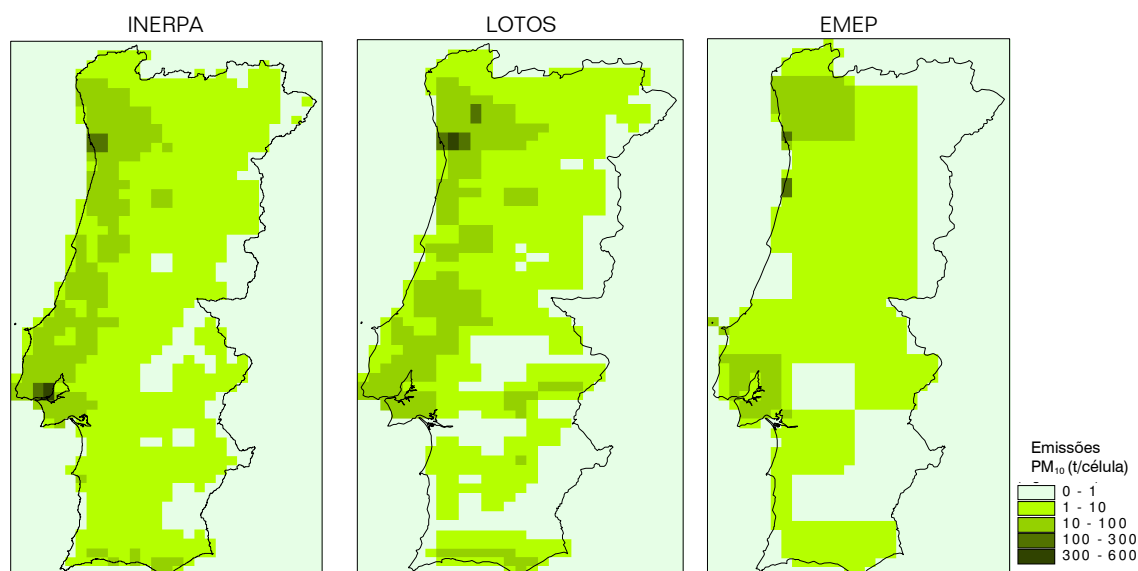


Figura 3.16. Exemplo de conversão das emissões de  $PM_{10}$  dos três inventários para a grelha de resolução  $10 \times 10 \text{ km}^2$  usada na simulação do domínio de Portugal Continental.

Apesar da desigualdade das matrizes de emissões, a comparação dos resultados da modelação aponta para a inexistência de diferenças significativas entre a aplicação directa dos vários inventários. A Figura 3.17 apresenta os resultados desta comparação em termos dos parâmetros estatísticos EQM e BIAS. A validação dos valores modelados, através da sua comparação com os observados em estações de fundo, permite ainda concluir que os erros calculados em todas as simulações, tanto para  $O_3$  como  $PM_{10}$ , são relativamente baixos ( $EQM < 25 \mu\text{g m}^{-3}$ ) e os factores de correlação elevados ( $r > 0,65$ ), sugerindo que todos são adequados para a modelação da qualidade do ar para Portugal [Monteiro *et al.*, 2007a].

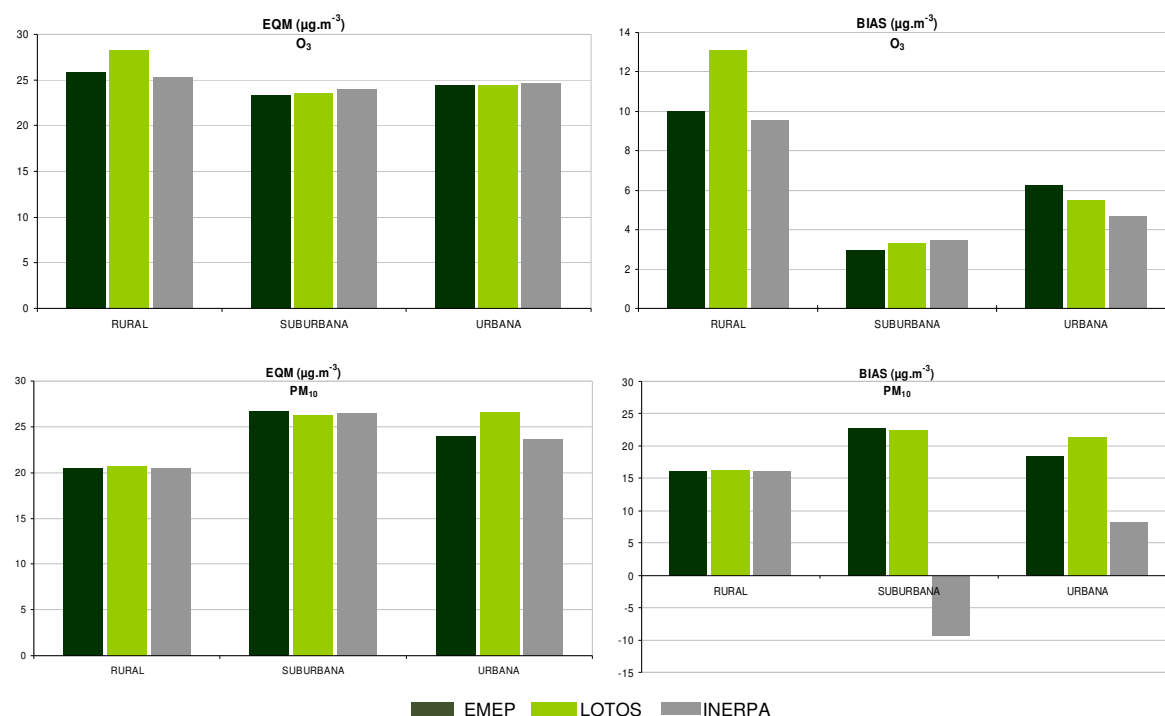


Figura 3.17. Desvios verificados (EQM e BIAS) entre os valores observados e modelados ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ) com cada inventário de emissões, considerando a média para os diferentes tipos de estações de fundo.

O valor positivo do BIAS<sup>8</sup> indica, porém, que existe uma tendência para subestimar as concentrações em todos os inventários, sendo tal facto mais notório na aplicação do LOTOS. Há, no entanto, uma inversão no sinal do BIAS na análise das partículas quando é usado o inventário nacional (INERPA), o que poderá dever-se a uma particular sobrestimativa das emissões de partículas na região do Porto, indicando prováveis problemas na desagregação espacial das emissões de  $PM_{10}$  por concelho. No entanto, de um modo geral, pode afirmar-se que o inventário nacional apresenta os valores de BIAS mais baixos, sendo por isso aconselhável o seu uso, em detrimento dos outros inventários, na aplicação a Portugal Continental.

Este exercício de validação dos inventários, com recurso à modelação da qualidade do ar, permitiu viabilizar o seu uso nas simulações numéricas para o domínio de Portugal Continental, apesar da identificação de algumas deficiências e inconsistências dos dados de emissões, que propiciam, contudo, futuras revisões e desenvolvimentos. As aplicações numéricas realizadas serão apresentadas em detalhe nos próximos capítulos.

<sup>8</sup> O BIAS é definido por:

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - M_i)$$

$O_i$  - concentração observada na hora  $i$ ;  $M_i$  - concentração simulada para a hora  $i$ ;  $N$  - número de pares de amostras

## Chapter IV.

### Air quality assessment for Portugal

The air quality modelling system MM5-CHIMERE was applied over Portugal in order to understand the origin of air pollution and to verify the fulfillment of the limit targets and threshold values imposed by the EC directives with respect to the most critical pollutants. The first step of this air quality assessment involved an extensive model validation following the quality assurance/quality control procedures [Borrego *et al.*, 2007] and settling the acceptability of modelling results. The validation exercise is focused on the year 2001 application because it is a reference year for the National Emission Ceilings programme (NEC), a monitoring database from diffusive sampling campaigns are available [Ferreira *et al.*, 2001] and it was not a critical year in terms of forest fires.

Statistical analysis shows a modelling system able to reproduce the  $O_3$  peak concentrations and the daily average of  $PM_{10}$ , with correlations above 0.5 at background stations. Regarding  $PM_{10}$ , these correlation scores are on the higher end of the range of correlations when compared with those obtained by several regional air quality models [Vautard *et al.*, 2006]. For ozone, statistical skills are significantly improved if  $O_x$  is considered instead of  $NO_2$  and  $O_3$  separately. This could be an indication of the lack of representativeness of stations, which may be influenced by local sources. However, there is a general tendency to overestimate the ozone concentrations, which could be due to a model bias or an emissions overestimation. This last hypothesis is corroborated by the also negative bias observed for  $NO_2$ .

For both pollutants ( $O_3$  and  $PM_{10}$ ), RMS and normalized errors are higher and correlation coefficients are lower for traffic stations, indicating that the horizontal model grid size is insufficient to resolve city plumes. The model also exhibits poor skill at industrial stations, which could result from the lack of knowledge about the magnitude and variability of local emissions. Nevertheless, large RMS errors are found for some of suburban stations, which cannot be interpreted without further information on the observation sites.



In addition to these statistical indicators, other parameters are recommended by the U.S. Environment Protection Agency [USEPA, 1996] in order to evaluate the performance of photochemical models. The estimated performance indices fall within the acceptable ranges showing that the model is adequate for air quality management, with a particularly good ability to predict higher and peak ozone concentrations. The original ozone time series was split into different spectral components allowing the identification of the time scales that are responsible for the correlation structure in the original data and determining which processes are poorly represented. Following the methodology presented in Hogrefe *et al.* [2001], the ozone hourly time series was spectrally decomposed using the log-transformation of the original time series into four specific periods, namely intra-day component, diurnal component, synoptic component and the longer-term (baseline) component. The model predicts a variance distribution that is very close to the observations. In both cases, the diurnal component is the largest contributor to the overall variance, followed by the synoptic, baseline and intra-day component. However there is a slight underestimation of the intra-day component and a more significant overestimation of the diurnal time scales. The baseline variance is best captured by the model, suggesting that the model is able to reproduce the changing synoptic conditions, to capture the seasonal variation of the solar flux and changes in vegetation coverage and biogenic emissions. The variability of the diurnal component is the most overestimated, suggesting that the model does not properly capture all processes that characterize the diurnal cycle and that are associated with the diurnal variation of the solar flux. The correlation for the intra-day component is less than 0.4, suggesting that despite the good variance agreement, the processes contributing to the high-frequency fluctuations are not completely captured by the model [Monteiro *et al.*, 2005a].

Moreover, a qualitative comparison between modelling results and the average concentrations of  $\text{NO}_2$  and  $\text{O}_3$  obtained in a two-week diffusive sampling campaigns was performed. Some discrepancies were found in areas that were not covered by the national monitoring network, such as the north and southeast regions. This could be due to a deficient emission inventory of Spain (namely point sources emissions) and a consequent underestimation of the boundary conditions over Portugal domain.

Regarding  $\text{PM}_{10}$ , two seasonal periods (summer and winter) were distinguished and evaluated separately. In summer, a relatively low bias and normalized error exist at almost all stations, comparatively to the winter season, when model predicts several significant PM peaks inconsistent with observations, particularly at urban sites. Erroneous winter peaks were also found by Hodzic *et al.* [2005]. Several possible sources of errors could simultaneously be present:  $\text{PM}_{10}$  emissions could be overestimated; the lack of anthropogenic heat fluxes in densely populated city centers, where heating contributes to the dominant part of total heat fluxes [Pigeon *et al.*, 2006], can lead to an underestimation of the boundary layer height and the dispersion of pollutants; and  $\text{PM}_{10}$  measurements can also be underestimated due to the evaporation of nitrates. Nevertheless, the

correlation coefficients at suburban background stations are larger in winter. This suggests that in summer emissions from natural sources (e.g. dust from North Africa) could be an important event for PM concentrations and responsible for the less accurate model results. In fact, in summer, polluted plumes are more efficiently dispersed within the boundary layer and emissions from larger scale become important. Regarding the main particulate species (ammonium, sulfate, nitrate and secondary organic aerosol (SOA)), the model results were compared to the available aerosol measurements campaign conducted in Aveiro in the course of the European CARBOSOL project [Pio *et al.*, 2007]. The CHIMERE model seems to underestimate the three aerosol components at this monitoring site. These findings are consistent with results obtained at different European sites [Bessagnet *et al.*, 2004; Hodzic *et al.*, 2006a] and could be explained by several reasons, including a less correct simulation of the chemical and physical processes, especially in the case of SOA [Pun *et al.*, 2003], and uncertainties on emission data and measurements [Pio *et al.*, 2007]. Nevertheless, the model is able to predict the seasonal variation of all species and the respective contribution of each inorganic constituent for the overall mass of the inorganic aerosol [Monteiro *et al.*, 2007d].

Model results were also evaluated according to the quality objective measures described in the EU directives and interpreted as the maximum error without timing [Borrego *et al.*, 2007]. An alternative model error measure, proposed by Flemming and Stern [2007], was also tested, showing that the model system is able to reproduce the various legislated percentiles with this alternative error indicator, meeting the accuracy requirements for almost all the pollutants' limit thresholds.

Overall, this detailed validation exercise indicates a good model performance simulating gas and aerosols, namely O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> supporting the use of these model results for air quality assessment and future reduction scenarios analysis.

In order to verify the fulfilment of the legislated limits, air quality assessment was performed following the limit values required for each pollutant. With regard to NO<sub>2</sub>, the metropolitan urban areas of Porto and Lisbon present values exceeding the limit parameters. Because the remaining area does not present any critical values, this suggests that road traffic is the main activity responsible for the high concentrations of NO<sub>2</sub>. The modelling results related to SO<sub>2</sub> show two areas where the concentrations exceeded the limit values, identified as industrial places. For CO, there are no concentrations higher than the human health protection limit and very low annual average values are found over mainland Portugal.

The target value for O<sub>3</sub> defined for human health protection is exceeded in specific coastal areas downwind of Porto and Lisbon urban centers. There are risky vegetation areas with values exceeding the AOT40 threshold. Unfortunately, according to the land use map, these areas correspond to high-density vegetation and forest regions. The concentration patterns indicate a potential advection and transport of pollutants from the major urban centers to the coast and to some inland parts of

Portugal [Monteiro *et al.*, 2007b]. This was foreseen in previous mesoscale modelling studies performed in these specific regions [Borrego *et al.*, 2000; Barros *et al.*, 2003].

The spatial distribution of the annual and the maximum daily means of  $PM_{10}$  levels show the highest concentrations over the main cities of Lisbon and Porto and close to suburban areas. This is due to the concentration of primary anthropogenic emissions sources in these areas. Rural areas display background aerosol pollution levels, except for a few locations that are influenced by point source emissions.

The magnitude of  $PM_{10}$  annual mean values is similar to those found in Spain and Europe [Rodriguez *et al.*, 2004; Van Dingenen *et al.*, 2004] for rural ( $7-10 \mu g m^{-3}$ ), urban background ( $30-40 \mu g m^{-3}$ ) and traffic ( $45-55 \mu g m^{-3}$ ) areas. Simulation results show  $PM_{2.5}/PM_{10}$  mean ratios in the range 70-80%, similar to those found for Europe [Van Dingenen *et al.*, 2004] and its spatial distribution is consistent with the secondary organic aerosols (fine particles) model results [Querol *et al.*, 2001]. The spatial distribution of  $PM_{10}$  average and the  $PM_{2.5}/PM_{10}$  ratio indicate that these polluted areas are predominantly due to increases in the  $PM_{2.5}$  mass concentration. In the southern of the domain, the  $PM_{2.5}/PM_{10}$  ratio is expected to be overestimated, as local resuspended and wind blown dusts (coarse particles) in dry regions are not taken into account, since only climatologies of the GOCART model are considered as boundary conditions. The spatial distribution of the modelled SOA annual average confirms that these organic compounds result from the atmospheric oxidation of VOCs and gas-particle conversion, showing an increase at more remote locations after the transport and diffusion processes [Liousse *et al.*, 1996]. The simulated higher values of SOA in summer confirm the importance of the photochemical oxidation processes origin on rural aerosols [Castro *et al.*, 1999] and underline the importance of biogenic SOA in the troposphere. The small differences at the main urban areas can reflect the higher emissions at local level (e.g. residential wood burning) with more limited dispersion during the cold months of winter [Pio *et al.*, 2007].

The integrated analysis of model results for different years - namely 2001, 2004 and 2006 – allows us verifying the evolution of air quality patterns during this period. There is a considerable improvement on  $PM_{10}$  levels between 2001 and 2006, with critical areas much more restricted. The conclusions are different if  $O_3$  is analysed, showing a tendency for upper background ozone levels. However, this picture could only be realistic for this specific period and not representative of a long-term trend.

Additionally numerical simulations were performed to evaluate the fulfillment of the air quality limit values for 2010 considering the NEC scenarios, developed by each Member State in order to reduce the negative environmental impacts of acidification, eutrophication and ground-level ozone. Simulations were carried out first for the 2001 baseline year and then using the 2010 emissions scenarios. Modelling results confirm the efficiency of the emissions reduction strategies for 2010, predicting a complete fulfillment of the limit and threshold values. The improvement on air quality is significant over the urban centers, with respect to  $NO_2$ , and in the central part of Portugal for ozone.

## Capítulo IV

### 4. Avaliação da qualidade do ar em Portugal

A avaliação da qualidade do ar visou, numa primeira fase, a verificação do cumprimento dos valores limite estabelecidos pela legislação para os poluentes atmosféricos mais problemáticos, quer pelos elevados níveis registados em Portugal, quer pelos seus efeitos na saúde humana. Esta avaliação permitiu a identificação das áreas críticas em termos de poluição atmosférica, servindo como ferramenta base para a elaboração dos Planos e Programas que cada Estado-Membro é obrigado a elaborar e aplicar nas zonas que apresentem níveis de poluentes superiores aos limiares consagrados na legislação.

De modo a sustentar a veracidade dos resultados simulados, este exercício de avaliação é precedido de uma validação por comparação com valores observados nas estações de monitorização. Apesar deste trabalho e do próprio exercício de validação se focarem essencialmente nos poluentes alvo deste estudo,  $O_3$  e  $PM_{10}$ , é apresentado o diagnóstico e a avaliação da qualidade do ar para os restantes poluentes abrangidos pela legislação.

O sistema de modelação foi aplicado para o período 2001-2006. No entanto, será apenas descrita em pormenor a sua aplicação e respectiva validação para o ano de 2001, dado que este ano serviu de referência a vários estudos, entre eles o PTEN [IA, 2002a] e o projecto europeu de intercomparação de modelos EuroDelta [Van Loon *et al.*, 2007], para além de possuir um conjunto relevante de dados resultante de campanhas experimentais de monitorização [Ferreira *et al.*, 2001].

Os resultados obtidos para os restantes anos são alvo de comparação e análise integrada face ao ano de 2001. O ano de 2003 é abordado e tratado separadamente no próximo capítulo, devido à ocorrência excepcional de incêndios florestais que caracterizaram e influenciaram a qualidade do ar monitorizada. Para além do referido diagnóstico, é ainda apresentada a avaliação do impacto na qualidade do ar dos cenários de emissões futuros definidos, para 2010, pelo PTEN.

## 4.1 Validação do sistema de modelação

A aplicação do sistema de modelos ao ano 2001 foi realizada, tal como descrito na Secção 3.2.2.1, à escala europeia, numa primeira fase, e depois, através da técnica de “nesting”, ao domínio de Portugal Continental, com uma resolução horizontal de 10 x 10 km<sup>2</sup> (Figura 3.7). O forçamento sinóptico foi obtido através do modelo meteorológico MM5 (Secção 3.2.1.3) e os dados de emissões são relativos ao inventário de 2001 (Secção 3.2.3). As simulações são efectuadas em períodos de 5 dias consecutivos, sendo cada período iniciado com as concentrações obtidas no período anterior, de modo a existir uma continuidade no tempo.

O estabelecimento de procedimentos gerais para a garantia e controlo de qualidade de modelos de qualidade do ar é já um assunto de discussão antiga entre a comunidade científica [Borrego *et al.*, 2003a], apesar de continuarem a não existir metodologias padrão para sua avaliação. O exercício de validação apresentado neste estudo seguiu as recomendações elaboradas no âmbito do projecto europeu Air4EU sobre “Uncertainty modelling estimation”, resumidas por Borrego *et al.* [2007]. Devido à vasta aplicação e avaliação do modelo meteorológico MM5, quer ao nível nacional [Aquilina *et al.*, 2005; Carvalho *et al.*, 2006], quer mundial [Dudhia, 1993; Oncley e Dudhia, 1995], é apenas apresentada a validação respeitante ao modelo químico CHIMERE. A avaliação da componente meteorológica efectuar-se-á apenas para a previsão operacional (Capítulo 6).

O desempenho do modelo CHIMERE foi avaliado, primeiro, de uma forma qualitativa (por comparação gráfica) e quantitativamente, numa segunda fase. Esta última foi realizada recorrendo a um conjunto de parâmetros estatísticos seleccionados e à estimativa da incerteza, conforme definido pela legislação em vigor [Borrego *et al.*, 2007]. Ambas as fases de validação tiveram por base a comparação entre os resultados do modelo e as concentrações medidas nas estações pertencentes às redes regionais de monitorização da qualidade do ar (ver Figura 2.3 e 2.4). Dado que uma comparação ponto-a-ponto apresenta limitações associadas à representatividade espacial e temporal, normalmente desconhecida, dos dados observados nas estações de monitorização, foi realizada uma interpolação dos resultados do modelo entre as 8 células mais próximas de cada estação de monitorização. Para além disso, o exercício de validação compreendeu a comparação espacial entre os valores simulados e os resultados das campanhas experimentais com tubos de difusão, realizadas ao nível nacional durante duas semanas do ano em estudo.

### 4.1.1 Avaliação qualitativa

A avaliação qualitativa do desempenho de um modelo é geralmente expressa sob a forma gráfica, sendo os métodos mais tradicionais:

- séries temporais (concentrações simuladas e observadas são comparadas ao longo do período de simulação);

- “scatter plots” (concentrações observadas correlacionadas com simuladas);
- análise espectral (distribuição por frequências);
- mapas de contorno (representação de isolinhas de concentração).

Recorrendo aos métodos enumerados, apresenta-se, de seguida, uma análise comparativa entre os dados simulados e observados nas estações de monitorização da qualidade do ar.

#### 4.1.1.1 Poluentes gasosos - fotoquímica

Tal como em trabalhos anteriores de avaliação de modelos fotoquímicos [Schmidt *et al.*, 2001; Vautard *et al.*, 2001] e de acordo com os indicadores legislados para a protecção da saúde humana, relativamente à validação do ozono foram usados os máximos diários de  $O_3$  e  $NO_2$  (com base em concentrações horárias). Esta validação incidiu no período de Verão (Maio a Setembro), altura em que a actividade fotoquímica é máxima. Do conjunto de estações, listadas na Tabela 2.1, com recolha eficiente de dados em 2001, seleccionaram-se 4 para apresentação de séries temporais representativas de cada tipo de influência (fundo, tráfego e industrial) e de ambiente (urbano e rural), nomeadamente: Avanca, Ermesinde, Formosa e Lavradio. Apresenta-se na Figura 4.1 uma comparação entre os valores máximos diários observados e simulados para o Verão de 2001 para as quatro estações de monitorização referidas.

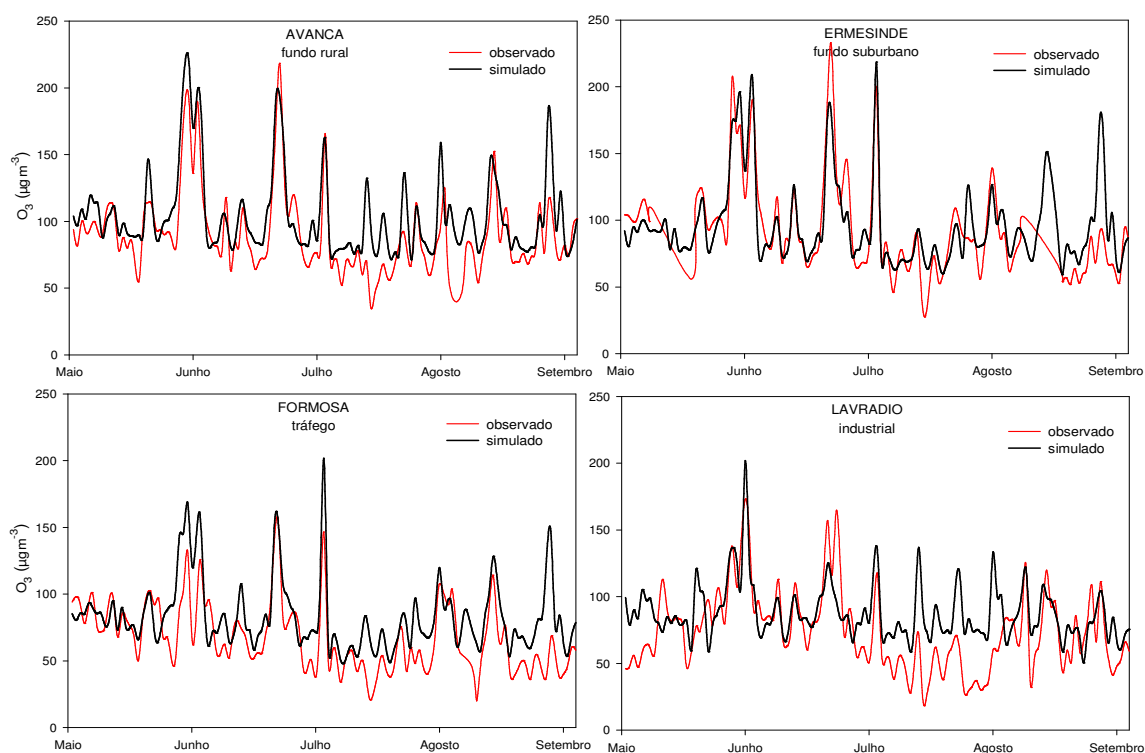


Figura 4.1. Comparação entre os máximos diários de  $O_3$  observados e simulados, para diferentes tipos de estações de monitorização e para o período de Verão (Maio-Setembro) de 2001.

Verifica-se que o modelo é capaz de reproduzir a variabilidade dos máximos diários de ozono, existindo uma elevada concordância entre os valores observados e simulados ao longo do Verão de 2001, principalmente nas estações de fundo apresentadas (Avanca e Ermesinde). A Figura 4.1 permite ainda observar a simulação correcta dos vários episódios de poluição fotoquímica (concentrações acima de  $150 \mu\text{g m}^{-3}$ ) existentes nestas duas estações, apesar de no episódio de 29 Maio - 1 Junho existir uma sobrestimativa dos picos e em 20 Junho o modelo subestimar as elevadas concentrações registadas.

Relativamente à estação de carácter industrial (Lavradio) e à de tráfego (Formosa), regista-se que o modelo tende a sobrestimar as concentrações de  $\text{O}_3$ , indicando que existe um potencial consumo deste poluente, não simulado pelo modelo, devido às emissões elevadas dos seus precursores, provenientes da actividade industrial e do transporte rodoviário.

Em relação ao  $\text{NO}_2$  a concordância diminui (Figura 4.2), apesar da média e da magnitude dos valores simulados serem coerentes com o observado. Tal como já verificado para o  $\text{O}_3$ , é na estação de fundo de Avanca que o modelo consegue prever melhor os valores máximos observados, exibindo maiores diferenças na estação de carácter industrial (Lavradio).

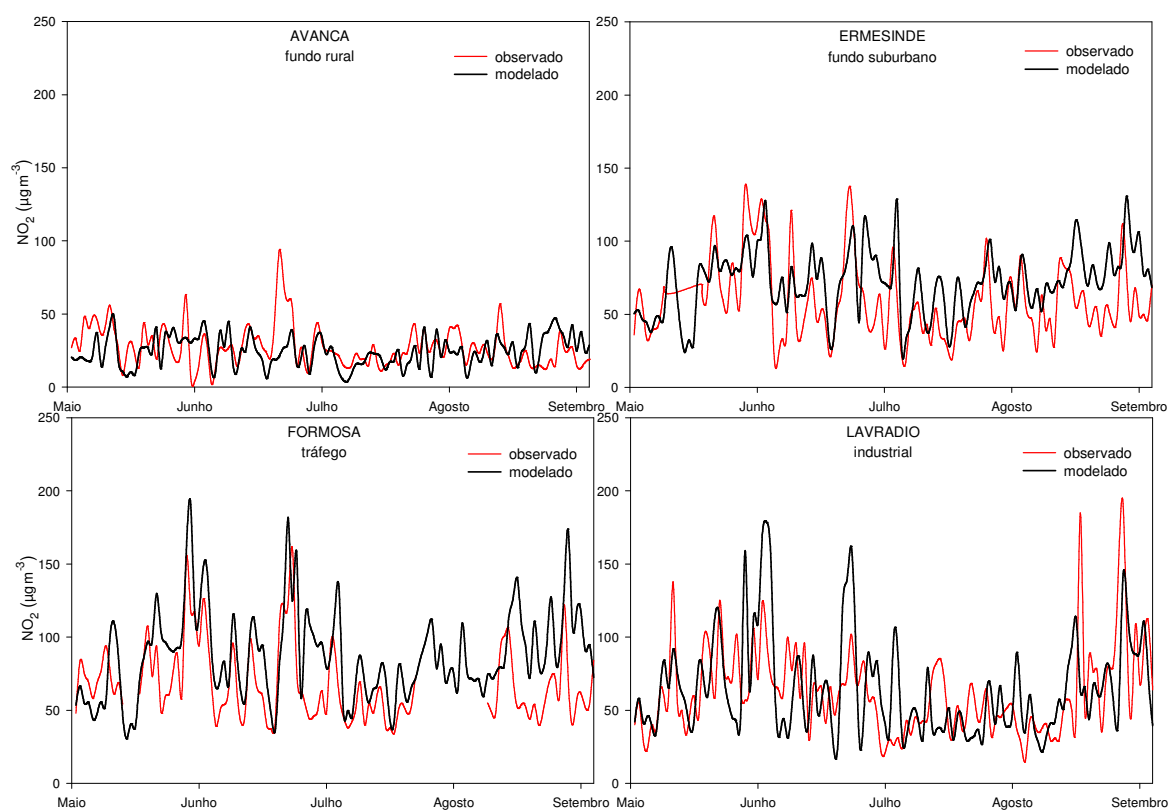


Figura 4.2. Comparação entre os máximos diários de  $\text{NO}_2$  observados e simulados para diferentes tipos de estações de monitorização, e para o período de Verão (Maio-Setembro) de 2001.

É ainda de referir que, ao analisar a variabilidade horária (Figura 4.3), se verificou que o modelo tem dificuldades em reproduzir as concentrações de  $O_3$  observadas durante a noite. À noite os valores de  $O_3$  são baixos devido ao seu consumo pelas emissões de NO, dado que na ausência da luz não ocorrem reacções fotoquímicas e a oxidação do NO torna-se a transformação mais importante e controladora da concentração de  $O_3$  [Seinfeld e Pandis, 1998]. Uma sobrestimativa das emissões de NO durante a noite pode ser a justificação para o inferior desempenho do modelo nas estações com influência urbana (Formosa e Ermesinde), ao contrário da estação de fundo rural de Avanca. Para além disso, a simulação da camada limite durante a noite é ainda um grande desafio para a modelação da qualidade do ar. Estudos revelam que o modelo meteorológico MM5 apresenta deficiências na simulação da altura de camada de mistura urbana [Liu *et al.*, 2004], sendo vulgar existir uma sobrestimativa da sua altura durante a noite, originando maior dispersão e concentrações de poluentes mais baixas nas cidades.

Os resultados das estações de Formosa e Ermesinde apontam ainda incorreções ao nível do perfil diário urbano usado para a desagregação temporal das emissões de tráfego.

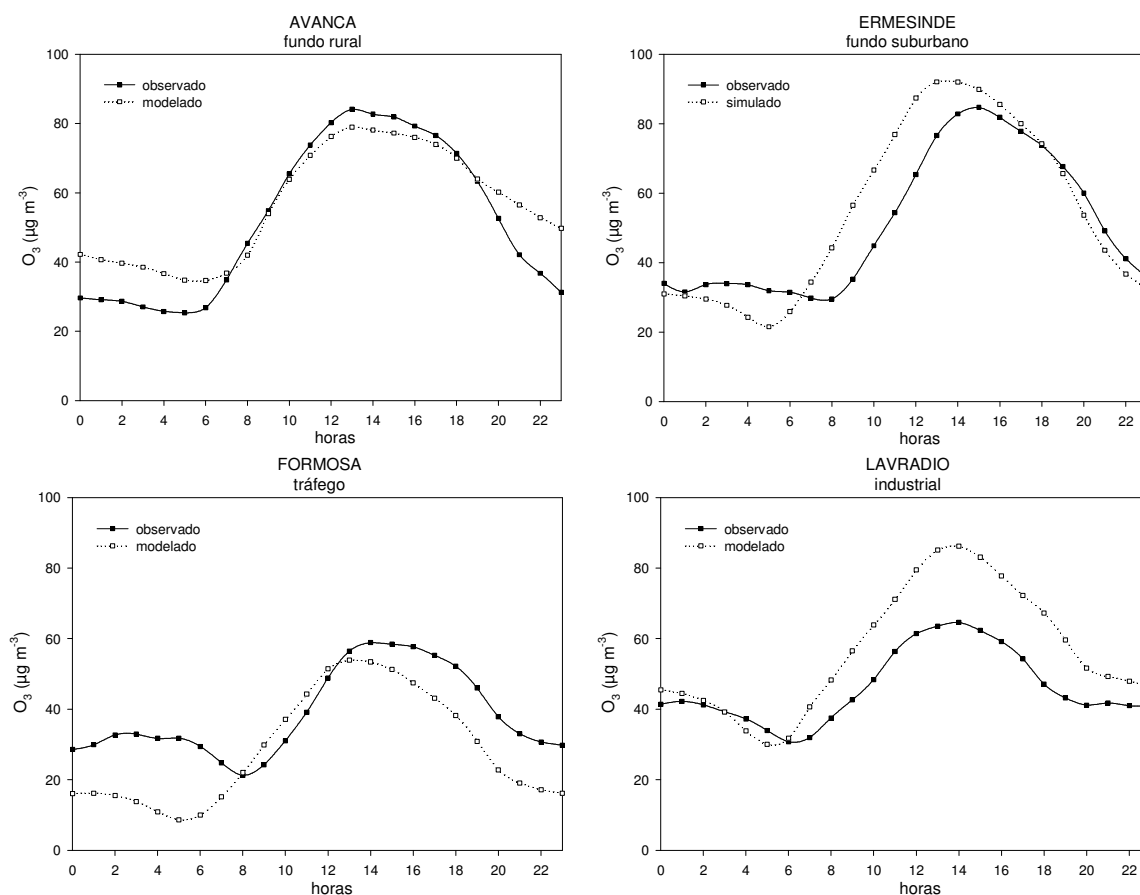


Figura 4.3. Comparação entre os perfis diários médios observado e modelado durante o Verão de 2001, para 4 estações com diferente tipologia (Avanca, Ermesinde, Formosa e Lavradio).



Se em vez dos dois poluentes separados, se representar graficamente a sua soma ( $O_x$ ), o desempenho do modelo é claramente melhor (Figura 4.4). Trata-se de um parâmetro mais conservativo que o  $O_3$  e que não é afectado pelo consumo pelo  $NO$ , servindo para uma melhor compreensão e interpretação dos desvios encontrados nas concentrações simuladas de  $O_3$  e  $NO_2$  [Ordóñez *et al.*, 2005]. De facto, a correspondência entre valores observados e simulados é significativamente mais próxima, mesmo para a estação industrial do Lavradio.

É interessante reparar ainda que, nas séries temporais de  $O_x$ , os desvios elevados no nível de fundo do ozono são aqui corrigidos. Isto sugere uma provável falta de representatividade das estações face à malha de cálculo do modelo ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ), as quais deverão estar a ser influenciadas por emissões locais de  $NO_x$ .

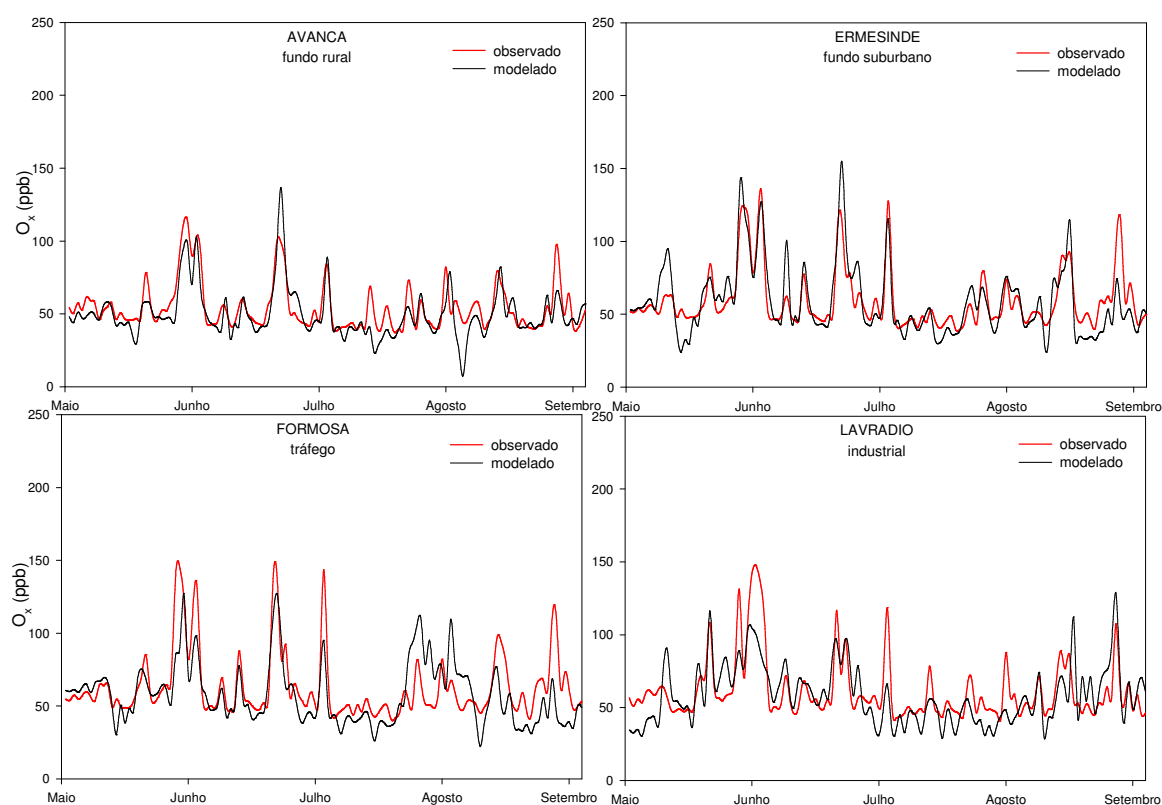


Figura 4.4. Comparação entre os máximos diários de  $O_x$  observados e simulados para diferentes tipos de estações de monitorização, e para o período de Verão (Maio a Setembro) de 2001.

A comparação entre valores observados e simulados através dos chamados gráficos de dispersão ("scatter plots") (Figura 4.5) revela características importantes sobre os desvios do modelo.

Apesar da dispersão em torno da diagonal, há uma tendência para o modelo sobrestimar as concentrações de ozono, que pode ser devida a uma sobrestimativa das emissões dos seus precursores ou das próprias condições fronteira. Tal como já verificado atrás, é na estação do

Lavradio que se verifica uma menor concordância dos valores máximos, confirmando a falta de representatividade desta estação face à malha de simulação, insuficiente para resolver plumas industriais. Mais uma vez, é notório o aumento da dispersão e variabilidade dos valores simulados de  $\text{NO}_2$  e o bom desempenho do modelo quando se consideram os resultados de  $\text{O}_x$ .

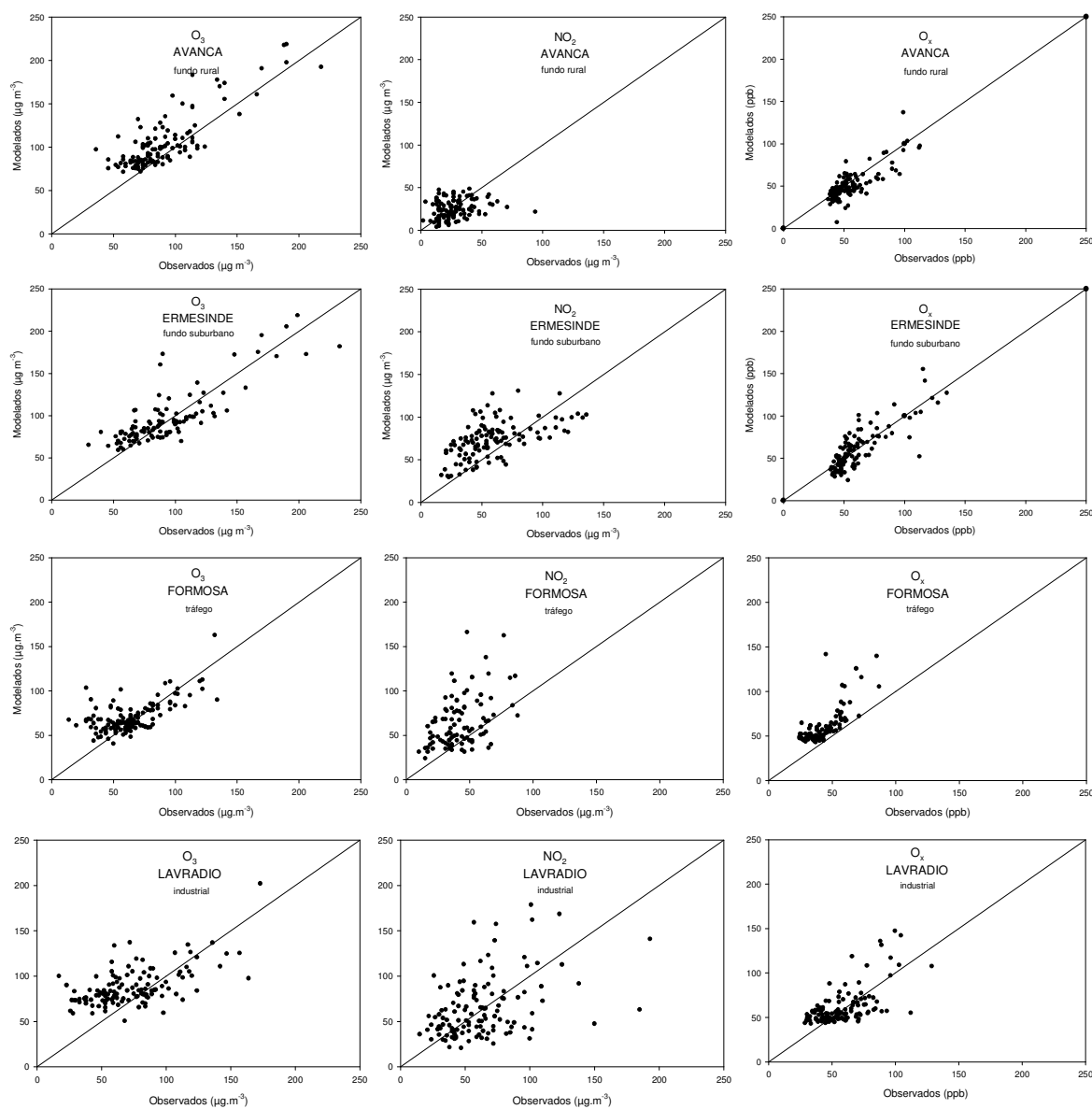


Figura 4.5. Máximos diários de  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_2$  e  $\text{O}_x$  simulados *versus* observados, para o período Verão (Maio a Setembro) de 2001

#### 4.1.1.2 Partículas

Apesar de existir um total de 17 estações de monitorização de  $PM_{10}$  em 2001, apenas 10 registaram uma eficiência superior a 85%. Para além disso, é de salientar que todas as estações existentes pertencem às áreas das Comissões de Coordenação e Desenvolvimento da Região Norte (CCDR-N) e da Região de Lisboa e Vale do Tejo (CCDR-LVT) (ver Tabela 2.2), tornando assim impraticável realizar a validação do sistema de modelos para outras regiões. Para além disso, dado que em 2001 ainda não existia nenhuma estação de monitorização de  $PM_{2,5}$ , foi impossível efectuar a validação do desempenho do modelo relativamente a esta fracção de matéria particulada.

Tal como para o ozono, mas neste caso analisando o ano inteiro de 2001, apresenta-se na Figura 4.6 a comparação dos valores médios diários de  $PM_{10}$  observados e simulados, para duas estações de fundo (Vila Nova da Telha e Laranjeiro), uma de tráfego (Av. Liberdade) e uma industrial (Lavrado).

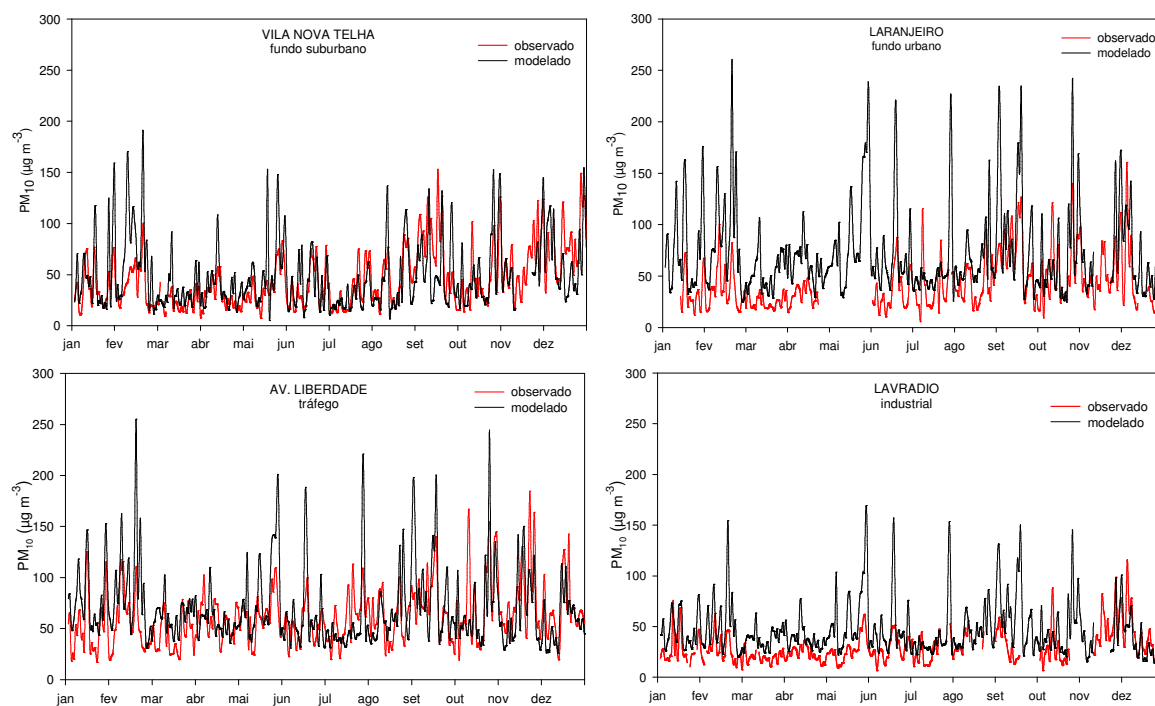


Figura 4.6. Comparação entre as concentrações horárias de  $PM_{10}$ , observadas e simuladas pelo modelo, em vários tipos de estações de monitorização, para 2001.

As variações temporais observadas são bem reproduzidas pelo modelo para os vários tipos de estações, apesar de uma evidente sobrestimativa dos valores simulados. Por outro lado, observa-se que existem maiores desvios nos primeiros dois meses simulados (Janeiro e Fevereiro), podendo indicar uma inadequada desagregação temporal do inventário anual ou uma menos correcta simulação dos parâmetros meteorológicos. Os picos sobrestimados e inconsistentes com as observações poderão estar relacionados com uma incorrecta simulação da camada de mistura, com consequências na dispersão dos poluentes.

#### 4.1.2 Avaliação quantitativa - análise estatística

A análise estatística é o método usado por excelência para caracterizar e avaliar o desempenho dos modelos, permitindo identificar algumas fontes de incertezas [Zannetti, 1990; Hanna *et al.*, 1993; Elbir, 2003]. Para além disso, e de acordo com as recomendações estabelecidas no âmbito do projecto Air4EU [AIR4EU, URL8], esta avaliação constitui o segundo passo das “Basic Recommendations for modelling uncertainty estimation”, a seguir à comparação qualitativa anteriormente apresentada [Borrego *et al.*, 2007].

Hanna *et al.* [1993] recomendam um conjunto de parâmetros estatísticos para a avaliação pretendida, os quais têm sido usados em diversos estudos [Nappo e Essa, 2001; Ichikawa e Sada, 2002], tendo sido, para além disso, adoptados como método de referência no âmbito da União Europeia [Olesen, 2001]. De entre este conjunto de parâmetros, seleccionaram-se três principais: o factor de correlação ( $r$ ), o erro quadrático médio (EQM) e o erro sistemático médio (BIAS), dados pelas expressões:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O}_i)(M_i - \bar{M}_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O}_i)^2 \sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M}_i)^2}} \quad (4.1)$$

$$\text{EQM} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - M_i)^2} \quad (4.2)$$

$$\text{BIAS} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - M_i) \quad (4.3)$$

onde  $N$  é o número total de pares de amostras,  $O_i$  corresponde ao valor observado na hora  $i$  e  $M_i$  à respectiva concentração simulada. Estes 3 parâmetros fornecem informação complementar (não sobreposta) e devem, como tal, ser usados em conjunto, pois só assim se poderá obter uma análise completa do desempenho do modelo. O factor de correlação ( $r$ ) traduz a relação linear entre as concentrações, reflectindo uma melhor ( $r \approx 1$ ) ou menor ( $r \approx 0$ ) reprodução dos processos físicos e químicos atmosféricos. Os restantes parâmetros (EQM e BIAS) dão uma indicação do desvio existente entre as concentrações simuladas e observadas, quer em termos absolutos (EQM), quer sistemáticos (BIAS), permitindo tirar ilações sobre a magnitude e a tendência dos erros cometidos pelo modelo, respectivamente. Em ambos o valor ideal é zero.

A título de complementaridade dos resultados, e dado que 2001 se trata de um ano com um número limitado de estações de monitorização em funcionamento, apresenta-se no Anexo IV a mesma análise estatística para o ano de 2004 para os dois poluentes principais ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ).

## 4.1.2.1 Poluentes gasosos

Na Tabela 4.1 são apresentados os resultados dos parâmetros estatísticos referentes à simulação do ano 2001, para todas as estações com uma eficiência de recolha de dados superior a 85% e para os principais poluentes gasosos ( $O_3$  e  $NO_2$ ), bem como para o  $O_x$ .

Tabela 4.1. Parâmetros estatísticos estimados para cada estação de monitorização para as espécies  $NO_2$ ,  $O_3$  e  $O_x$ , relativos à simulação de 2001.

Estação	Tipo influência	$O_3$			$NO_2$			$O_x$		
		EQM ( $\mu g m^{-3}$ )	r	BIAS ( $\mu g m^{-3}$ )	EQM ( $\mu g m^{-3}$ )	r	BIAS ( $\mu g m^{-3}$ )	EQM (ppb)	r	BIAS (ppb)
ALF	Fundo	22,4	0,65	10,3	30,4	0,53	-20,3	19,0	0,7	-10,7
AVA	Fundo	18,4	0,78	-5,0	21,7	0,59	-2,3	10,9	0,8	0,9
BEA	Fundo	21,9	0,73	-9,2	33,8	0,49	-11,3	16,4	0,8	-0,7
ERM	Fundo	22,8	0,78	10,4	32,8	0,58	-18,0	13,0	0,8	-2,6
LAR	Fundo	22,8	0,77	-10,1	35,9	0,64	-14,4	15,9	0,7	-1,5
LEC	Fundo	22,5	0,73	-13,2	32,2	0,62	-18,5	16,2	0,7	-1,8
LOU	Fundo	19,9	0,85	-6,9	29,2	0,68	-21,9	10,4	0,8	-5,2
MVE	Fundo	19,0	0,66	3,5	9,3	0,53	-0,8	16,8	0,5	0,9
PP	Fundo	20,1	0,80	-2,8	35,3	0,59	-18,4	14,4	0,8	-5,4
REB	Fundo	22,2	0,71	-4,2	33,5	0,63	-24,4	14,3	0,8	-7,0
VNT	Fundo	25,5	0,64	-11,6	34,3	0,63	-15,1	16,2	0,8	-1,2
CUS	Industrial	33,7	0,53	-25,3	32,5	0,48	-13,2	25,6	0,8	4,2
LAV	Industrial	35,2	0,70	-27,7	> 35	<0,4	-20,1	17,9	0,6	2,6
MCH	Industrial	18,7	0,62	-8,1	13,4	<0,4	8,2	21,3	0,5	5,7
TEI	Industrial	27,5	0,77	5,7	27,5	<0,4	-0,1	18,0	0,8	-2,0
ENT	Tráfego	36,6	0,38	-23,7	31,8	<0,4	-19,3	22,4	0,8	1,5
FOR	Tráfego	28,2	0,48	-7,7	> 35	<0,4	-15,4	17,7	0,8	-2,6
HVE	Tráfego	23,8	0,58	-13,3	30,2	<0,4	-26,1	29,2	0,4	-4,4
<b>Média</b>		<b>24,5</b>	<b>0,68</b>	<b>-9,3</b>	<b>29,0</b>	<b>0,58</b>	<b>-14,0</b>	<b>17,5</b>	<b>0,7</b>	<b>-1,6</b>

Tal como seria de esperar, e relativamente ao ozono, são as estações de fundo que apresentam menores erros ( $EQM < 25 \mu g m^{-3}$ ) e maiores factores de correlação ( $r > 0,65$ ), dado que se tratam de locais de monitorização mais representativos da resolução da grelha usada na aplicação numérica ( $10 \times 10 km^2$ ). Em relação às estações de tráfego, é em Entrecampos (ENT) que se verificam os maiores erros e menores correlações, o que não será de estranhar face à localização desta estação numa das artérias principais da cidade de Lisboa. É de salientar o valor negativo do erro sistemático médio (BIAS) para quase todas as estações, revelando que o modelo sobrestima, de uma maneira geral, as concentrações de ozono, sugerindo uma provável sobrestimativa das emissões dos seus precursores.

Uma análise às estações de carácter industrial permite concluir que no Lavradio (LAV), em Custóias (CUS) e Teixugueira (TEI), o desempenho do modelo é inferior (erros superiores e factores de correlação mais baixos). Tal facto poderá estar relacionado com a elevada actividade industrial (tanto pequena como grande indústria) existente nestas zonas, que deverá estar incorrectamente

estimada/representada, em termos de emissões atmosféricas e do perfil temporal, na célula de cálculo do modelo ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ). Por outro lado, o desempenho do modelo em estações de fundo costeiras, nomeadamente em Monte Velho (MVE), localizada perto de Sines, permite concluir que o sistema de modelação aplicado reproduz com mais dificuldade ( $r$  inferior à média) a circulação atmosférica característica desta zona costeira (circulações dominantes de noroeste potenciadas pela brisa marítima) e responsável pelo transporte dos precursores de ozono, desde a sua emissão em Lisboa, até à costa vicentina [Barros, 1999].

Relativamente ao  $\text{NO}_2$ , confirma-se um desempenho inferior do modelo, quer analisando o erro quadrático médio, quer o factor de correlação. Este facto poderá ser justificado por se tratar de um poluente primário (emitido directamente para a atmosfera) cujas concentrações estão directamente relacionadas com os seus níveis de emissões e, logo, mais sensíveis aos erros nas emissões e meteorologia. Por outro lado, as espécies emitidas têm um gradiente vertical elevado que não é correctamente resolvido pelos modelos actuais [van Loon *et al.*, 2004]. O refinamento da estrutura vertical do modelo CHIMERE e uma descrição mais adequada dos processos de mistura vertical são, actualmente, alvo de desenvolvimento neste modelo. Apesar disto, e tal como seria de esperar, é nas estações de fundo que se registam os menores desvios e a maior correlação entre os valores observados e simulados. O valor negativo do BIAS em todas as estações vem comprovar a hipótese de uma sobrestimativa das emissões de  $\text{NO}_x$  (precursor de ozono).

O desempenho estatístico é significativamente melhorado quando se analisa  $\text{O}_x$ , em vez dos dois poluentes em separado. Por definição,  $\text{O}_x$  é muito menos sensível às emissões e respectivas incertezas dado que não é afectado pelo equilíbrio fotoquímico entre  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  e  $\text{O}_3$ . Isto é, um erro nas emissões de  $\text{NO}$  pode alterar dramaticamente a concentração de ambos os poluentes ( $\text{NO}_2$  e  $\text{O}_3$ ), mas não da sua soma ( $\text{O}_x$ ). Uma outra fonte de incerteza que pode surgir, e não afecta  $\text{O}_x$ , está relacionada com a representatividade das estações de monitorização. A estação de tráfego de Entrecampos (ENT), não representativa da grelha de simulação, é um exemplo perfeito da relação  $\text{O}_3$ - $\text{NO}_2$ - $\text{O}_x$ , apresentando erros elevados e correlações baixas para o  $\text{O}_3$  e o  $\text{NO}_2$ , apesar de  $\text{O}_x$  ser satisfatoriamente bem simulado. É de salientar, contudo, que o valor médio negativo do desvio BIAS para  $\text{O}_x$  confirma a hipótese de sobrestimativa das emissões de  $\text{NO}_x$ , em particular sobre as áreas urbanas.

De forma a analisar o desempenho do modelo na sua globalidade, apresenta-se, na Figura 4.7, o erro sistemático normalizado (considerando a média de todas as estações) *versus* o tempo. Na maioria dos dias, o erro sistemático médio mantém-se abaixo de 0,4. No entanto, há 5 dias com erros particularmente elevados identificados no gráfico. Uma análise meteorológica mostra condições sinópticas similares em todos estes dias, caracterizadas por uma depressão de origem térmica à superfície e um centro de altas pressões a 500 hPa sobre toda a Península Ibérica. A pesquisa das retrotrajectórias revela que nestes dias o ar foi transportado desde o Atlântico, estando de acordo

com as condições fronteira fornecidas e simuladas à escala europeia [NOAA, URL9]. Assim sendo, estes erros poderão dever-se a uma menos correcta simulação destas condições meteorológicas, aliada a uma insuficiente resolução vertical usada no modelo CHIMERE.

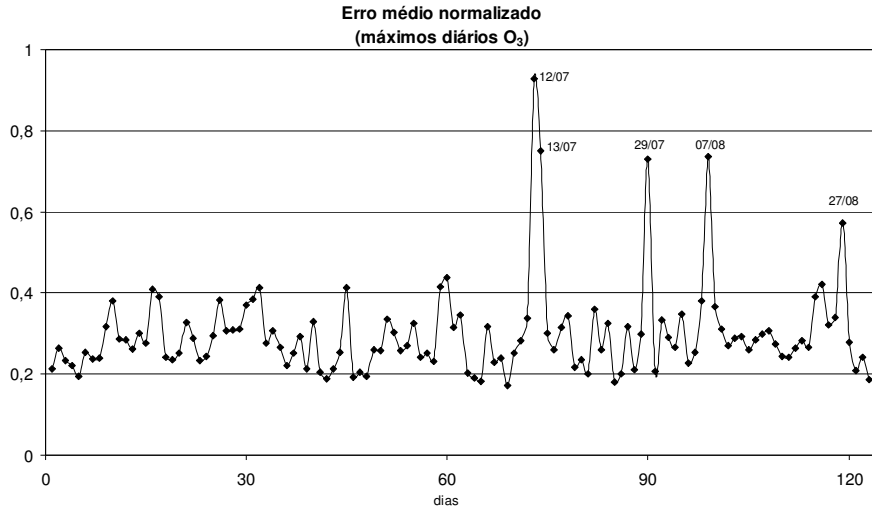


Figura 4.7. Erro sistemático normalizado (média de todas as estações), para os máximos diários de  $O_3$ , durante o Verão de 2001.

Para além dos referidos parâmetros estatísticos, foram usados, para o caso do  $O_3$ , indicadores alternativos recomendados pela “United States Environment Protection Agency” (USEPA) para a avaliação de modelos fotoquímicos [USEPA, 1996], nomeadamente:

- Precisão do maior valor calculado para o domínio ( $A_u$ )

$$A_u = \frac{C_o(.,.) - C_p(.,.)}{C_o(.,.)} \times 100\% \quad (4.4)$$

- Teste de desvio normalizado ( $D_k$ )

$$D_k = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{H_i} \frac{C_o(i, j) - C_p(i, j)}{C_o(i, j)} \quad (4.5)$$

- Erro associado aos valores superiores a  $120 \mu\text{g m}^{-3}$  ( $E_d$ )

$$E_d = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{H_i} \frac{C_o(i, j) - C_p(i, j)}{C_o(i, j)} \quad (4.6)$$

onde:

$C_o(.,.)$  - máxima concentração horária observada em todas as horas e estações;

$C_p(.,.)$  - máxima concentração horária simulada em todas as horas e células do domínio;

$C_o(i, j)$  - concentração observada na estação  $i$ , à hora  $j$ ;

$C_p(i, j)$  - concentração simulada na estação  $i$ , à hora  $j$ ;

$N$  - número de estações de monitorização;

- $H_i$  - número de pares horários modelo-observação para uma estação de monitorização  $i$   
 $N_i$  - número total de estações-horas

Tal como se constata pela análise destes parâmetros, o principal objectivo da USEPA é avaliar a capacidade dos modelos de qualidade do ar em simular os picos horários de ozono, que se verifiquem em qualquer estação do domínio de estudo e, em particular, acima do valor limite estabelecido pela USEPA ( $120 \mu\text{g m}^{-3}$ ), bastante mais exigente do que o limiar horário vigente em Portugal e na União Europeia ( $180 \mu\text{g m}^{-3}$ ).

Tesche *et al.* [1990] estabeleceram, com base em várias simulações fotoquímicas, que este tipo de modelos produz resultados aceitáveis quando estes três parâmetros se encontram nas respectivas gamas:  $\pm 15$ -20,  $\pm 5$ -15 e  $\pm 30$ -35%. Assim sendo, considerando todas as estações e horas simuladas,  $A_u$  tem o valor de 19,8,  $D_k$  é igual a -15,7 e E assume o valor de 8,2. Verifica-se que todos os índices estimados se encontram nas gamas aceitáveis, mostrando que o modelo CHIMERE tem um comportamento satisfatório na simulação de  $\text{O}_3$  e será adequado, segundo a USEPA, para aplicações no âmbito da gestão da qualidade do ar. O valor consideravelmente baixo de E revela que o modelo tem particular capacidade para prever picos de ozono.

Para efectuar uma avaliação mais completa do desempenho de um modelo de longo prazo, é aconselhável a sua separação nas diferentes componentes espectrais, com gamas específicas de frequências e flutuações. Esta análise permite a identificação das escalas temporais responsáveis pelas maiores correlações e a determinação dos processos melhor e pior representados pelo modelo, de modo a ajudar futuros desenvolvimentos.

Segundo a metodologia apresentada por Hogrefe *et al.* [2001], as séries temporais de ozono observadas e simuladas foram decompostas espectralmente em 4 séries distintas, caracterizadas por diferentes processos responsáveis pela formação de ozono: componente intradiurna (ID), diurna (DI), sinóptica (SY) e de longo prazo (LT), as quais estão relacionadas com a transformação logarítmica da série original P, por:

$$P(t) = e^{\text{ID}(t)} e^{\text{DI}(t)} e^{\text{SY}(t)} e^{\text{LT}(t)} \quad (4.7)$$

A Tabela 4.2 apresenta a distribuição da variância entre as componentes das séries temporais observada e simulada (considerando a média de todas as estações de monitorização).

Verifica-se que o modelo prevê uma distribuição da variância muito próxima da observada. Em ambos os casos, a componente diurna é a principal contribuinte para a variância total (tal como seria expectável, dado que DI inclui as diferenças entre dia e noite), seguida das componentes sinóptica, longo prazo e, finalmente, intradiurna.



Tabela 4.2. Contribuição relativa (%) da variância das componentes da série temporal para a variância total existente entre observações e simulações; soma das variâncias e variância da série original.

Observações						Simulações					
ID	DI	SY	LT	soma	original	ID	DI	SY	LT	soma	original
10	46	27	17	0,99	0,82	8	51	26	14	1,25	1,00

De modo a comparar a quantidade de energia estimada em cada uma das escalas temporais, observadas e simuladas, determinaram-se o coeficiente de correlação e as razões das variâncias simulada e observada, para cada componente temporal (Tabela 4.3).

Tabela 4.3. Coeficiente de correlação e razão de variâncias (modelado/observado) para as várias componentes da série temporal.

Coeficiente correlação					Razão variâncias (Modelado/Observado)				
Original	ID	DI	SY	LT	Original	ID	DI	SY	LT
0,60	0,38	0,69	0,55	0,59	1,23	0,96	1,42	1,29	1,02

Observa-se uma ligeira tendência para o modelo subestimar ID e, por outro lado, sobrestimar significativamente a escala diurna, sugerindo que o modelo não consegue simular correctamente todos os processos que caracterizam o ciclo diurno. Estes processos, associados à variação diurna da radiação solar, são responsáveis pela produção fotoquímica e consumo nocturno, assim como pelo ciclo diário da camada de mistura. As diferenças verificadas nas correlações para os períodos de dia (0,73) e noite (0,43) confirmam que as deficiências no consumo nocturno serão a principal explicação para a sobrestimativa da variância DI. A variância de longo prazo é a mais bem prevista pelo modelo.

Apesar do bom acordo de variâncias, a correlação para a componente ID é de apenas 0,4, indiciando alguns problemas na simulação dos processos intra-diurnos associados a esta componente e que contribuem para as flutuações de alta-frequência: turbulência horizontal, mistura vertical e reacções químicas locais (por exemplo consumo de NO).

As componentes sinóptica e de longo prazo apresentam correlações similares, superiores a 0,55. Estes resultados, combinados com a análise de variância, sugerem que as escalas temporais de longo prazo são bem representadas e simuladas pelo modelo CHIMERE. Estas escalas temporais incluem a simulação dos padrões sinópticos de transporte regional e da variação sazonal da radiação solar, assim como das alterações na cobertura da vegetação e respectivas emissões biogénicas [Monteiro *et al.*, 2005a].

#### 4.1.2.2 Partículas

Tal como para os poluentes fotoquímicos, apresenta-se na Figura 4.8 a validação do modelo para as médias diárias de  $PM_{10}$  [Monteiro *et al.*, 2007d], usando os vários parâmetros estatísticos atrás definidos, para as estações de fundo e tráfego (com eficiência superior a 85%), separadamente.

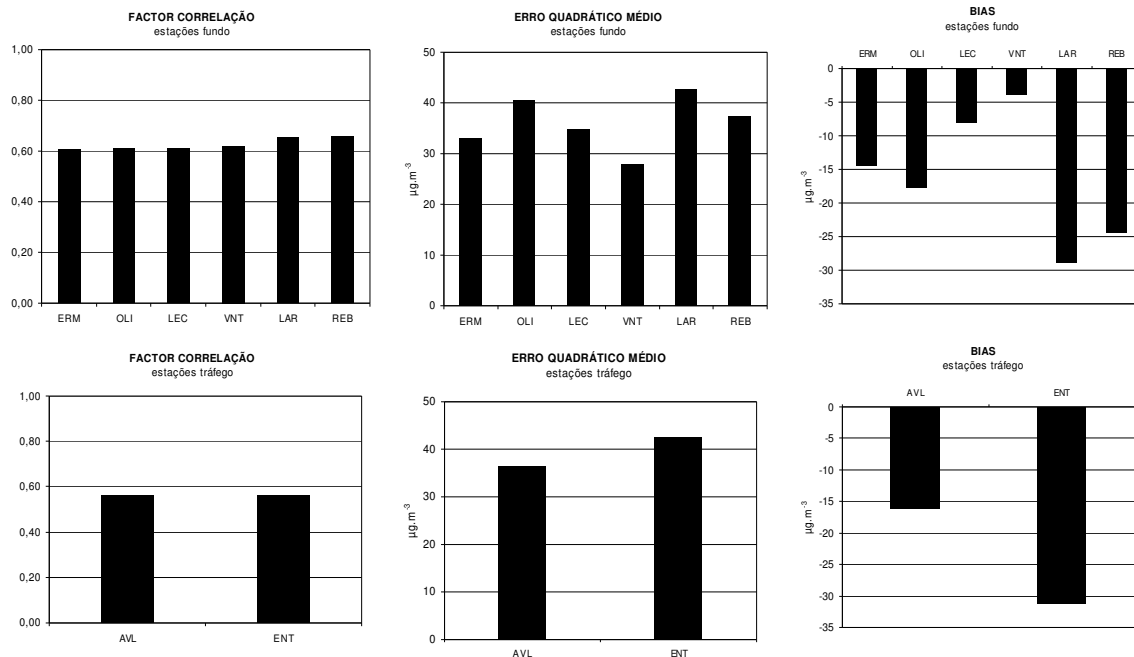


Figura 4.8. Avaliação estatística (r, EQM e BIAS) do desempenho do sistema de modelos na simulação de  $PM_{10}$ , para as estações de fundo (em cima) e de tráfego (em baixo).

Da análise da Figura 4.8, conclui-se que as concentrações médias diárias de  $PM_{10}$  de fundo, observadas e previstas pelo modelo, se correlacionam satisfatoriamente ( $r > 0,6$ ), apresentando erros absolutos inferiores a  $40 \mu g m^{-3}$ . É de salientar que estes valores revelam um desempenho muito razoável do modelo na simulação de  $PM_{10}$ , quando comparados com iguais indicadores de qualidade de vários modelos regionais de qualidade do ar [Holmes e Morawska, 2006; Vautard *et al.*, 2007]. Tal como já verificado para os poluentes gasosos, a correlação estimada entre os valores observados e modelados é menor (e os erros superiores) no caso das estações de tráfego ( $r < 0,6$  e  $EQM > 35 \mu g m^{-3}$ ), dado que estas não são representativas da malha ( $10 \times 10 km^2$ ) de simulação numérica. O BIAS sempre negativo confirma a hipótese anterior de que os valores de  $PM_{10}$  simulados estão sobrestimados, quer os de fundo, quer os de origem urbana (tráfego).

Esta análise sugere que poderá existir uma sobrestimativa do inventário de emissões relativamente a este poluente, pelo menos em relação às aglomerações do Porto e Lisboa, onde esta validação é possível. Esta poderá ser a justificação para os erros sistemáticos mais elevados encontrados neste estudo face a outros estudos realizados com o mesmo sistema de modelos, mas para outras regiões,

nomeadamente Paris [Hodzic *et al.*, 2005]. De forma a compreender melhor o desempenho do modelo, foram avaliados separadamente os períodos do Verão e Inverno. A Figura 4.9 apresenta a comparação entre os desvios encontrados para os dois períodos, para as estações de fundo.

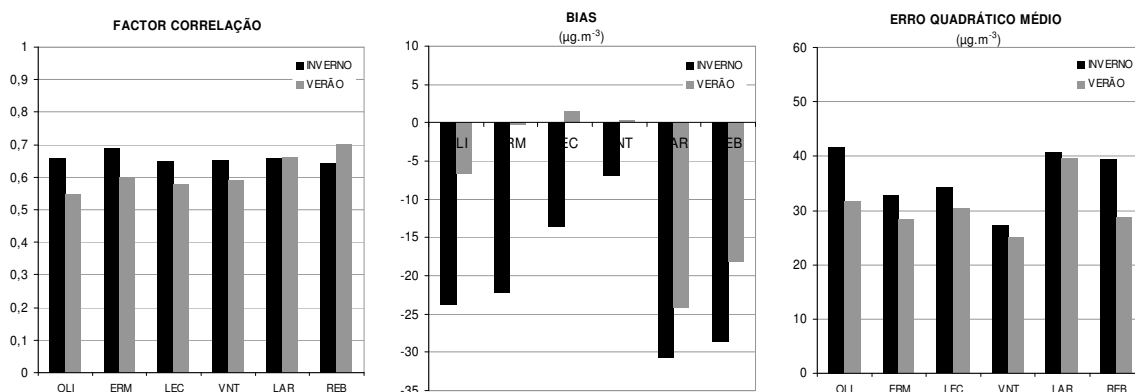


Figura 4.9. Avaliação estatística (r, BIAS e EQM) do desempenho do sistema de modelos na simulação de PM<sub>10</sub>, durante o Verão e o Inverno, e para as estações de fundo.

Tal como já observado na análise das séries temporais, verifica-se que os erros são superiores no Inverno. No Verão observam-se erros relativos e sistemáticos baixos na maioria das estações (BIAS < 20 µg m<sup>-3</sup> e EQM < 30 µg m<sup>-3</sup>), comparativamente com o período do Inverno onde se encontram BIAS próximos de 30 µg m<sup>-3</sup> e EQM iguais a 40 µg m<sup>-3</sup>.

Os erros superiores obtidos no Inverno são devidos, em parte, aos picos de PM<sub>10</sub> incorrectamente previstos neste período e assinalados durante a validação qualitativa (ver Figura 4.6). A simulação destes picos no Inverno já foi também encontrada por Hodzic *et al.* [2005]. Várias fontes de erro podem estar presentes em simultâneo: uma provável sobrestimativa das emissões de PM<sub>10</sub>; uma deficiente simulação do fluxo calorífico gerado nos centros urbanos populacionais [Pigeon *et al.*, 2006], conduzindo à subestimativa da altura da camada de mistura urbana e consequente menor dispersão dos poluentes; e ainda medições de PM<sub>10</sub> subestimadas devido à evaporação de nitratos.

Verifica-se, no entanto, que os factores de correlação são superiores no Inverno em algumas estações de fundo suburbanas. A maior ocorrência de eventos naturais durante o verão, cujas emissões não são contabilizadas no inventário de emissões, poderá justificar este facto. Por outro lado, poderá haver incorrecções ao nível do perfil temporal usado na desagregação das emissões no período de Verão, já que se trata de um perfil médio e distinto apenas para 3 tipos de dias (dia de semana, sábado e domingo) que poderá não traduzir a realidade desta época de férias em Portugal.

Salienta-se o melhor desempenho do modelo verificado na aplicação ao ano 2004, cuja validação se apresenta no Anexo IV. Este facto deverá estar relacionado com um inventário de emissões mais correcto e actualizado [Monteiro *et al.*, 2007].

Aerossóis: componente orgânica e inorgânica

De modo a alargar a validação do modelo aos vários componentes do aerossol atmosférico, analisaram-se os seus resultados relativamente às principais espécies particuladas, nomeadamente amónia, sulfatos, nitratos e aerossol orgânico secundário (SOA). Esta validação baseou-se na comparação dos seus valores com as médias medidas em Aveiro, durante uma campanha experimental intensiva realizada entre 2002 e 2004, no âmbito do projecto europeu CARBOSOL [Pio *et al.*, 2007; Gelencsér *et al.*, 2007].

A Tabela 4.4 resume esta comparação, para os períodos de Verão e Inverno. Apesar de se tratar de um único ponto de avaliação, pode concluir-se que o modelo CHIMERE parece subestimar os vários componentes do aerossol atmosférico. Tal facto é consistente com os resultados obtidos, pelo mesmo sistema de modelos, em diferentes locais da Europa [Bessagnet *et al.*, 2004; Hodzic *et al.*, 2006a]. Apontam-se várias razões para a sua explicação, incluindo uma simulação menos correcta dos processos químicos e físicos (especialmente de SOA, cuja formação ainda possui um elevado grau de incerteza [Pun *et al.*, 2003]), para além de erros nas emissões e nas próprias medições.

Tabela 4.4. Comparação entre valores médios de aerossóis (inorgânicos e orgânicos) observados e simulados em Aveiro, para os períodos de Verão e Inverno de 2001.

Componente aerossol	Verão		Inverno	
	Observado* ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	Modelado ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	Observado* ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	Modelado ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )
SO <sub>4</sub>	4,5	4,0	2,2	1,8
NH <sub>3</sub>	1,7	0,9	0,9	0,6
NO <sub>3</sub>	0,6	0,2	1,3	0,4
SOA	2,8	2,5	3,5	2,0

\*médias obtidas em campanhas experimentais realizadas durante 2002-2004 [Pio *et al.*, 2007; Gelencsér *et al.*, 2007]

Apesar de tudo, o modelo é capaz de prever a variação sazonal de todas as espécies e a respectiva contribuição de cada componente inorgânico relativamente à massa total do aerossol inorgânico: cerca de 67-78% de sulfatos, 18-25% de amónia e menos de 1% de nitratos.

A aparente subestimativa de SOA, particularmente no Inverno, pode ser devida à definição deste componente no modelo. De facto, SOA é classicamente definido como carbono orgânico não proveniente de emissões primárias, mas os resultados experimentais de Pio *et al.* [2007] revelaram que as medições de SOA incluem a condensação de compostos orgânicos semi-voláteis primários resultantes de fontes não específicas, como a queima de biomassa, que em Portugal tem um papel excepcionalmente importante durante o Inverno. Para além disso, as incertezas nas medições, devido a dificuldades tecnológicas, podem também ter um papel relevante (não existe método analítico capaz de distinguir entre aerossol primário e secundário, recorrendo-se geralmente a rácios empíricos entre carbono orgânico e elementar (OC/EC)).

#### 4.1.3 Estimativa da incerteza definida pela legislação

A estimativa da incerteza associada à modelação é definida pelo Decreto-Lei nº 111/2002 como sendo o “*desvio máximo dos níveis de concentração medidos e calculados durante todo o período considerado pelo valor limite (para todos os percentis  $p$ ), sem ter em conta a sequência dos acontecimentos*”, isto é, ignorando o intervalo de tempo usado e simulado no processo de modelação numérica (que pode ir de 1 hora a mais de 365 dias). Esta medida de incerteza deve respeitar os objectivos de qualidade definidos para cada poluente (ver Tabela 4.5) e é expressa pelo parâmetro RME (“Relative Maximum Error”):

$$RME = \frac{\max(|Co_p - Cp_p|)}{Co_{p_{\max(Co_p - Cp_p)}}} \quad (4.8)$$

Tabela 4.5. Objectivos de qualidade definidos pela legislação para a avaliação da concentração dos poluentes por técnicas de modelação.

Poluente	Indicador qualidade	Objectivo qualidade	Legislação
SO <sub>2</sub> , NO <sub>2</sub> , NO <sub>x</sub>	Média horária	50-60%	DL nº 111/2002 (1999/30/EC) (2000/69/EC)
	Média diária	50%	
	Média anual	30%	
PM <sub>10</sub>	Média anual	50%	DL nº 320/2003 (2002/3/EC)
CO	Média octo-horária	50%	
O <sub>3</sub>	Média octo-horária	50%	
	Média horária	50%	

A questão do tempo é relevante quando se trata de valores limite horários e diários. Para além disso, os requisitos de aceitação do modelo são dados como incertezas relativas, sem uma clara indicação de como calcular essa relatividade [Borrego *et al.*, 2007]. Assim sendo, Flemming e Stern [2007] sugerem uma modificação ao cálculo desta incerteza, definindo um erro relativo para cada um dos percentis ( $p$ ) estabelecidos pela legislação como valores limite de concentração, eliminando assim o problema da escala temporal. Este novo parâmetro é definido como RPE (“Relative Percentil Error”) e expresso pela fórmula:

$$RPE = \frac{|Co_p - Cp_p|}{Co_p}, p \quad (4.9)$$

onde  $Co_p$  representa o valor do parâmetro (percentil  $p$ ) determinado a partir das observações e  $Cp_p$ , o valor do mesmo parâmetro (percentil  $p$ ) estimado a partir dos resultados do modelo. Para além de se tratar de uma medida de erro mais robusta, permite avaliar o desempenho do modelo nas gamas de concentrações mais altas (valores limite), tal como exigido pela legislação. No caso das PM<sub>10</sub>, tal questão não se coloca, uma vez que o valor limite a ser analisado implica apenas médias anuais, pois

ainda não foram definidos objectivos de qualidade dos dados de modelação para as médias diárias (Tabela 4.5). A estimativa da incerteza foi calculada de acordo com os parâmetros RME e RPE para cada estação de monitorização de fundo e para os vários poluentes referidos na legislação. Na Tabela 4.6 é apresentado o desvio médio obtido pelos dois indicadores, tendo em conta todas as estações de monitorização com eficiência superior a 85% no período de estudo.

Tabela 4.6. Estimativa da incerteza média para todas as estações de monitorização, relativamente a cada um dos parâmetros definidos na legislação (Anexo I).

Poluente	Parâmetros	Límite exigido	RME	RPE
SO <sub>2</sub>	Protecção da saúde humana (25ª máxima hora)	0,5-0,6	0,79	<b>0,34</b>
	Protecção da saúde humana (4ª média diária)	0,5	0,66	0,57
	Protecção da vegetação (média anual)	0,3	<b>0,29</b>	<b>0,29</b>
	Protecção da vegetação (média inverno)	0,5	0,51	0,51
NO <sub>2</sub>	Protecção da saúde humana (19ª máxima hora)	0,5-0,6	0,81	<b>0,48</b>
	Protecção da saúde humana (média anual)	0,3	0,50	0,50
CO	Protecção da saúde humana (máxima média 8h diária)	0,5	0,69	<b>0,32</b>
O <sub>3</sub>	Protecção da saúde humana (26ª máxima média 8h diária)	0,5	0,55	<b>0,16</b>
	Protecção da vegetação (AOT40)	0,5	0,71	0,51
PM <sub>10</sub>	Protecção da saúde humana (média anual)	0,5	<b>0,42</b>	<b>0,42</b>

Ao analisar os resultados de acordo com o parâmetro RPE, conclui-se que o sistema de modelos apresenta um bom desempenho na avaliação da qualidade do ar para o ano em estudo, 2001, dado que os desvios calculados para os parâmetros legislados para cada poluente são geralmente inferiores, ou iguais, aos limites impostos pela legislação. As ilações serão, porém, diferentes se a mesma análise for feita relativamente ao indicador RME, com excepção dos poluentes com limites médios anuais definidos. Daqui se infere a importância da definição de um parâmetro adequado para indicador de qualidade e selecção da técnica de modelação. Uma análise por poluente permite observar que os menores desvios se verificam para o O<sub>3</sub> e o CO, ambos com valores limite referentes a médias octo-horárias. Dado que o sistema de modelos foi especialmente desenvolvido para simular poluentes fotoquímicos, seria de esperar um bom desempenho do modelo químico em relação ao O<sub>3</sub>. Relativamente ao CO, o facto de se tratar de um poluente quase inerte, que não exige nenhum conjunto complexo de reacções químicas para a sua simulação e sujeito apenas à dispersão atmosférica, pode ser a justificação para a sua correcta estimativa. Ao contrário do CO, a simulação do SO<sub>2</sub> apresenta maior dificuldade, dado tratar-se de um poluente reactivo e participante num elevado número de reacções que incluem, por exemplo, a complexa química dos aerossóis.

Uma análise idêntica, mas para cada estação, é apresentada no Anexo IV relativamente à aplicação ao ano 2004. Também aqui se verificaram valores de RPE baixos para o O<sub>3</sub> (0,21) e PM<sub>10</sub> (0,44).

#### 4.1.4 Validação do modelo com campanhas experimentais

Para além da avaliação qualitativa e quantitativa, foi realizada uma validação espacial (e não estação-a-estação) comparando os resultados da modelação com as concentrações médias obtidas para os períodos em que foram realizadas campanhas de medição com tubos de difusão [Ferreira *et al.*, 2001]. Estas campanhas nacionais, descritas no Capítulo 2 (Secção 2.3), foram realizadas no período de 7 a 21 Maio de 2001 para os poluentes NO<sub>2</sub> e O<sub>3</sub>, e de 21 a 29 de Junho, para o O<sub>3</sub> apenas, com uma resolução espacial de 20x20 km<sup>2</sup>. Na Figura 4.10, 4.11 e 4.12, apresentam-se os mapas com as concentrações médias obtidas por modelação e medidas nos períodos das campanhas.

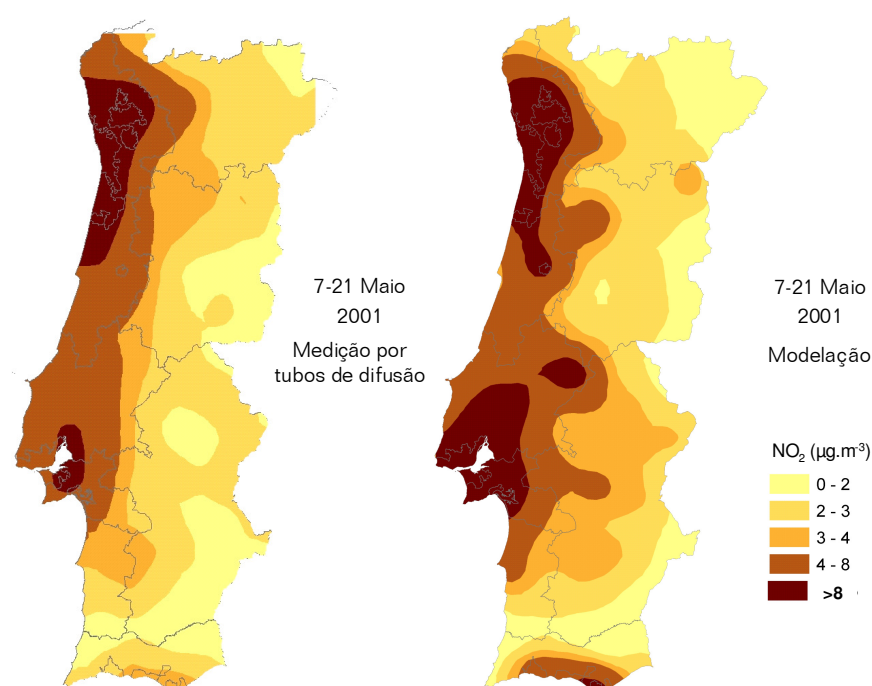


Figura 4.10. Mapas de concentração de NO<sub>2</sub> resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 7-21 Maio 2001.

Verifica-se que, em relação ao NO<sub>2</sub> (Figura 4.10), existe concordância entre os valores simulados e os observados na campanha experimental para quase toda a área de Portugal Continental, excepto na região do Alto Alentejo e Algarve. Tal facto pode dever-se a uma sobrestimativa por parte do modelo ou à menor resolução da grelha espacial dos tubos de difusão.

Relativamente ao ozono, os resultados da campanha de Maio (Figura 4.11) apresentam alguns desvios na distribuição espacial das concentrações médias de O<sub>3</sub>, principalmente na região do interior nordeste e algarvia. A omissão de emissões provenientes de Espanha e consequente subestimativa das concentrações fronteira, aliada a incorrecções na simulação meteorológica apontam-se como as principais justificações para esta diferença.

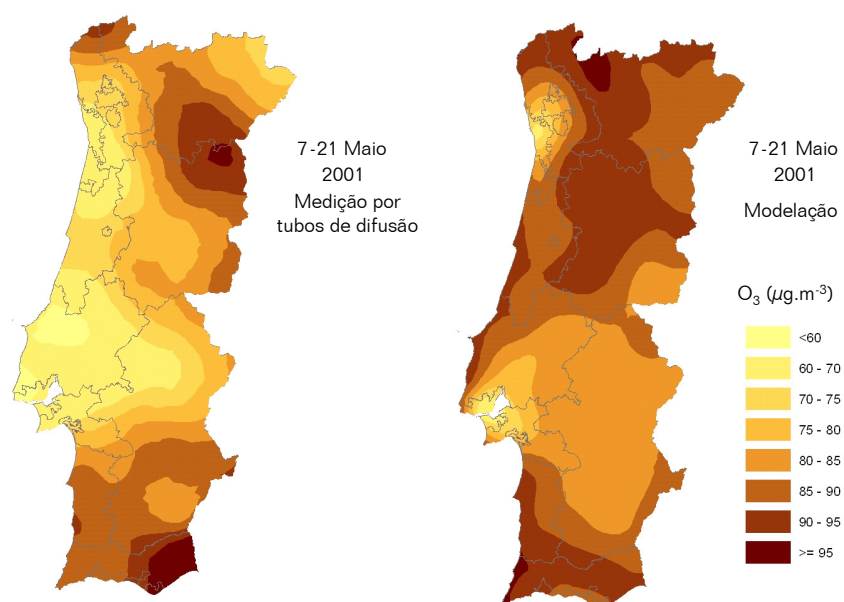


Figura 4.11. Mapas de concentração de  $O_3$  resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 7-21 Maio 2001.

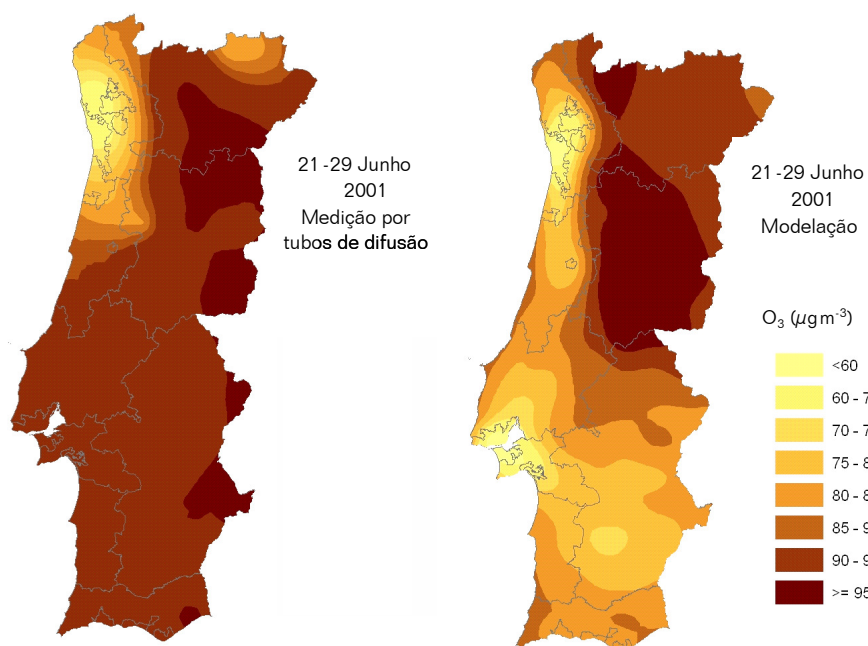


Figura 4.12. Mapas de concentração de  $O_3$  resultantes da campanha de tubos de difusão e da modelação, no período 21-29 Junho 2001.

As diferenças encontradas nos resultados relativos à segunda campanha de ozono, para a região Sul de Portugal (Figura 4.12), são devidas a problemas de interpolação, uma vez que não existiam amostras de tubos nesta região durante o período da campanha. A comparação permite, no entanto, verificar a concordância existente entre os padrões de concentrações, medidos e simulados, na região Norte do país.



## 4.2 Avaliação da qualidade do ar em 2001

O exercício de validação apresentado permite viabilizar a aplicação do sistema de modelos MM5-CHIMERE para o caso de estudo de Portugal Continental, ao demonstrar um desempenho satisfatório na simulação da fotoquímica e dos aerossóis. Para os desvios identificados foram apontadas possíveis justificações que permitem a melhoria contínua do desempenho do modelo e uma mais correcta interpretação dos resultados.

Apesar do presente trabalho incidir nos dois poluentes que registam concentrações mais críticas no panorama nacional ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ), a análise dos resultados das simulações e o consequente diagnóstico da qualidade do ar foram estendidos aos restantes poluentes compreendidos na legislação vigente e abrangidos no processo de validação, nomeadamente:  $NO_2$ , CO e  $SO_2$ .

Esta avaliação da qualidade do ar compreendeu a análise do cumprimento da legislação em vigor, cujos valores limite, juntamente com a margem de tolerância aplicável para o ano em estudo (2001), se encontram resumidos no Anexo I. É de salientar que foi incluída a análise de  $PM_{2,5}$ , apesar da ausência da sua monitorização e consequente validação. O valor limite para  $PM_{2,5}$  refere-se à concentração média anual máxima admissível (“concentration cap”) constante da nova proposta de Directiva da qualidade do ar<sup>9</sup>.

De seguida apresentam-se e interpretam-se os campos superficiais de concentração referentes a cada um dos indicadores legislados para os poluentes em estudo, resultantes da simulação numérica para o ano de 2001.

### 4.2.1 Dióxido de enxofre

No caso do dióxido de enxofre ( $SO_2$ ), os parâmetros definidos pelo Decreto-Lei nº 111/2002 de 16 Abril para avaliar a protecção da saúde humana e da vegetação dizem respeito a médias horárias, diárias, anuais e de Inverno.

A Figura 4.13 apresenta os resultados para cada um destes parâmetros. Não se verificam incumprimentos do valor limite horário. Em termos de médias diárias, estas restringem-se às áreas de Setúbal e do Pêgo. Contudo, ao analisar as médias anuais e de Inverno verificam-se também excedências nas regiões do Porto e Estarreja. A análise conjunta do mapa de concentrações e do inventário de emissões (Secção 3.2.3) aponta a indústria como a principal actividade responsável pelas elevadas concentrações deste poluente.

---

<sup>9</sup> Commission of the European Communities COM(2005) 447 final; {SEC(2005) 1133}.

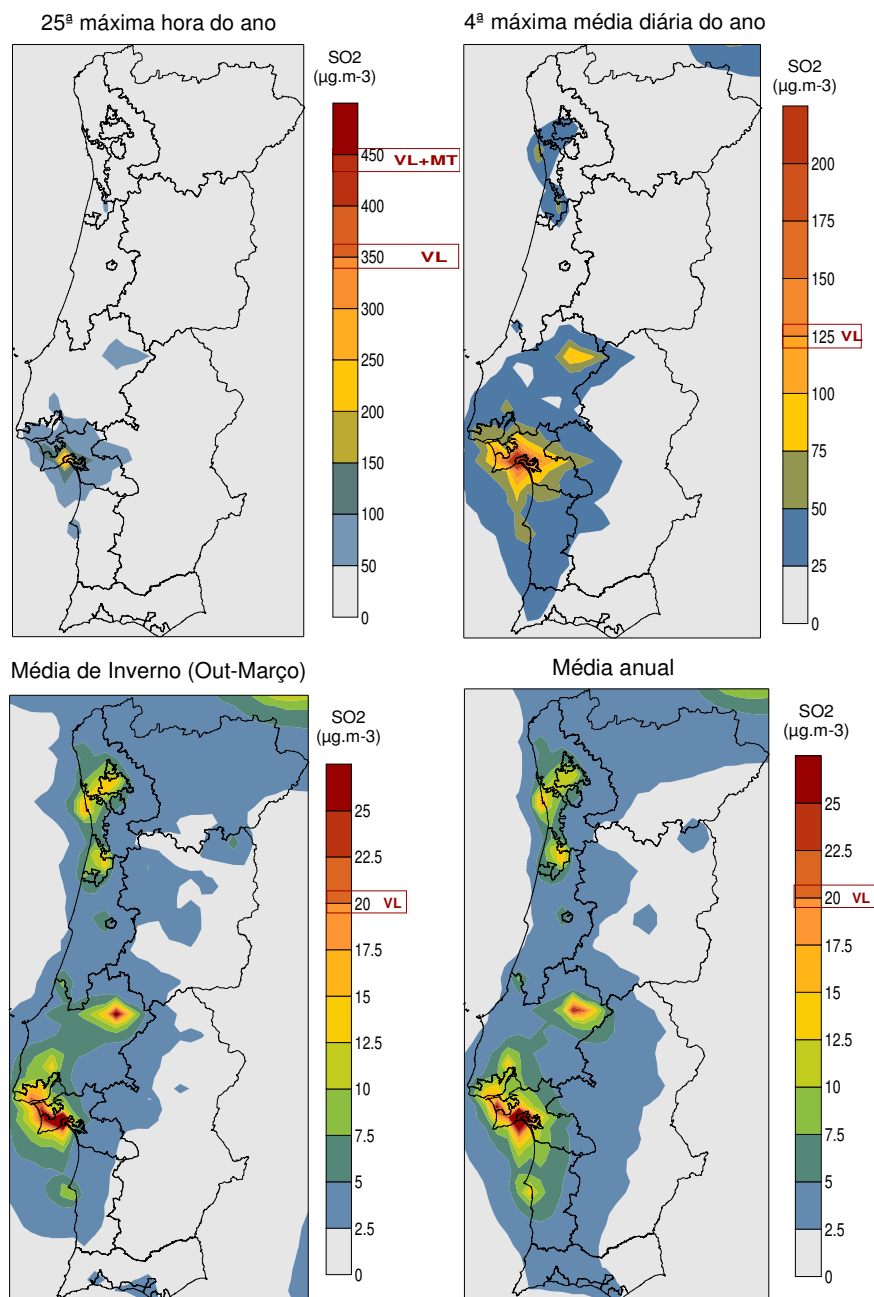


Figura 4.13. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o SO<sub>2</sub>, para 2001.

#### 4.2.2 Monóxido de carbono

Relativamente ao monóxido de carbono (CO), a legislação nacional em vigor (DL n.º 111/2002 de 16 Abril) define, como parâmetro de protecção à saúde humana, 10 mg m<sup>-3</sup> para o valor máximo diário das médias octo-horárias. A Figura 4.14 apresenta os mapas da concentração máxima desta média octo-horária de CO para o ano 2001, para além da média anual. Verifica-se que não existe nenhuma região em incumprimento desse valor limite. As concentrações estimadas apresentam valores relativamente baixos em todo Portugal Continental.

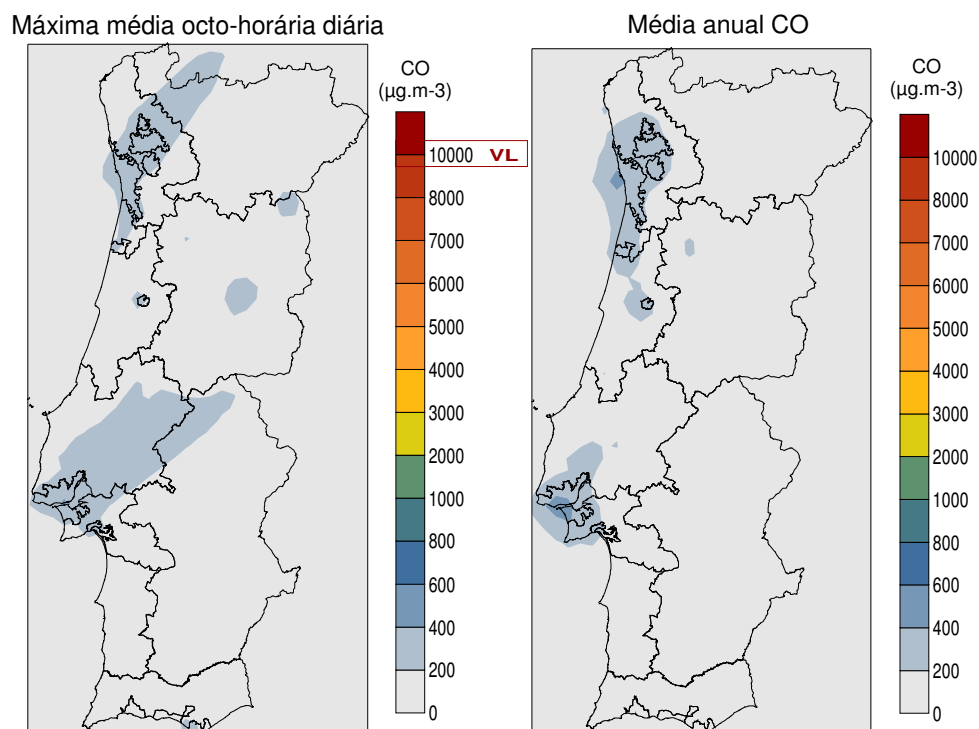


Figura 4.14. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o CO, para 2001.

#### 4.2.3 Dióxido de azoto

A Figura 4.15 apresenta os resultados da modelação para os indicadores horários e anuais definidos pela legislação para a protecção da saúde humana, relativamente ao dióxido de azoto ( $\text{NO}_2$ ). Em ambos os casos existem áreas onde o valor limite é ultrapassado, as quais correspondem às zonas urbanas do Porto e Lisboa. Foi atingindo, em ambas, um máximo próximo de  $240 \mu\text{g m}^{-3}$ , em termos da 19ª máxima hora, e de  $60 \mu\text{g m}^{-3}$  para a média anual.

Dado que o restante território não apresenta valores críticos nem excedências dos valores limite legislados, aponta-se o tráfego rodoviário como a principal causa das elevadas concentrações de  $\text{NO}_2$  nas duas áreas críticas referidas. Tal facto é confirmado pelas emissões de tráfego de  $\text{NO}_x$  existentes nestas áreas (Figura 3.14).

É de salientar, no entanto, que considerando a margem de tolerância (MT) admitida para 2001 ( $80 \mu\text{g m}^{-3}$ ), não há excedências ao valor limite (VL) horário acrescido da MT em nenhuma área de Portugal Continental.

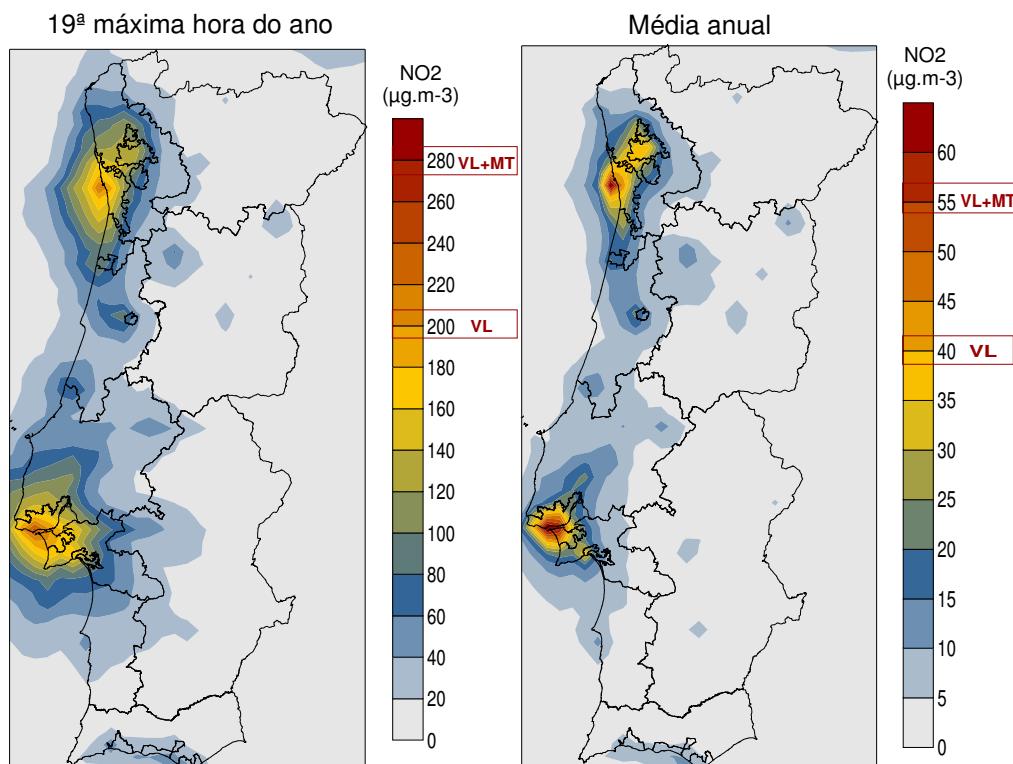


Figura 4.15. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o  $\text{NO}_2$ , para 2001.

#### 4.2.4 Ozono

A 3ª Directiva-filha referente ao ozono (2002/3/EC), transposta para a legislação nacional pelo DL n.º 320/2003 de 20 Dezembro, define como valores limite alvo, a cumprir até 2010,  $120 \mu\text{g m}^{-3}$  para a 26ª máxima média móvel octo-horária diária e  $18\,000 \mu\text{g m}^{-3}\text{h}$  para o valor de AOT40 (período Maio-Julho). A Figura 4.16 apresenta os mapas de concentrações para estes dois indicadores.

No caso do valor alvo para a protecção da saúde humana ( $120 \mu\text{g m}^{-3}$ ), verifica-se o incumprimento da legislação em zonas localizadas sob influência das áreas metropolitanas de Lisboa e Porto, para além de valores de médias octo-horárias também elevados sob o Oceano Atlântico.

Em relação ao valor alvo para a protecção da vegetação (AOT40), existem duas áreas (interior centro-norte do país e costa Vicentina) onde se registou incumprimento deste valor limite. Trata-se de duas zonas críticas, cuja densidade e extensão de vegetação é bastante relevante, tendo em conta o mapa de uso de solo nacional.

Esta distribuição das concentrações vem confirmar simulações numéricas de mesoscala, anteriormente realizadas, que sugerem um transporte dos precursores de ozono das zonas urbanas do Porto e Lisboa, devido aos ventos dominantes de norte-noroeste na costa portuguesa [Borrego *et al.*, 1994; Borrego, 1996; Barros, 1999; Monteiro, 2002].

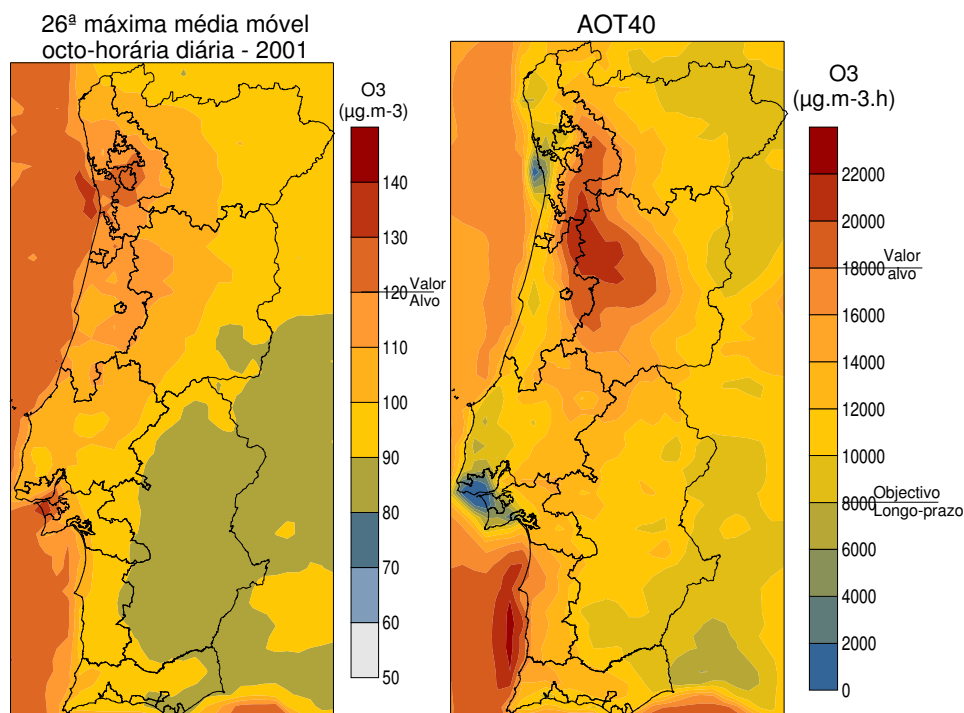


Figura 4.16. Resultados da modelação para os parâmetros definidos na legislação para o O<sub>3</sub>, para 2001.

Para além dos valores alvo a cumprir para a protecção da saúde humana e da vegetação, existem limiares horários definidos para informação ( $180 \mu\text{g m}^{-3}$ ) e alerta ao público ( $240 \mu\text{g m}^{-3}$ ). Na Figura 4.17 apresentam-se os mapas de concentração de ozono, para cada uma das horas em que se registaram, nas estações de monitorização, excedências ao limiar de informação ao público durante o ano de 2001.

De uma forma geral, conclui-se que o sistema de modelos simulou bem as excedências a este limiar, assinaladas em cada mapa, para os vários dias de episódio registados em 2001. No entanto, verifica-se um desempenho inferior do sistema de modelos na simulação da pluma de ozono sobre a região de Sines (estação de Monte Velho), em alguns dias de episódio (28 de Maio e 19 de Junho). A resolução da malha de  $9 \times 9 \text{ km}^2$  do modelo meteorológico poderá não ser suficiente, em alguns casos, para simular a intensidade real das circulações de mesoscala (brisas marítimas) existentes nesta zona e potenciais responsáveis pelo transporte de poluentes da região urbana de Lisboa até à costa Alentejana [Borrego *et al.*, 1998; Barros, 1999].

É de notar que, em praticamente todos os episódios de ozono monitorizados durante o ano de 2001, o modelo prevê a existência de áreas com excedências ao limiar de informação não cobertas pelas redes de medição (Figura 2.3). Os dias 30 e 31 de Maio do ano 2001 são exemplo disso, onde se verifica uma pluma de ozono com concentrações acima dos  $180 \mu\text{g m}^{-3}$  numa vasta área do interior do país, onde não existia, até à data, nenhuma estação de monitorização da qualidade do ar.

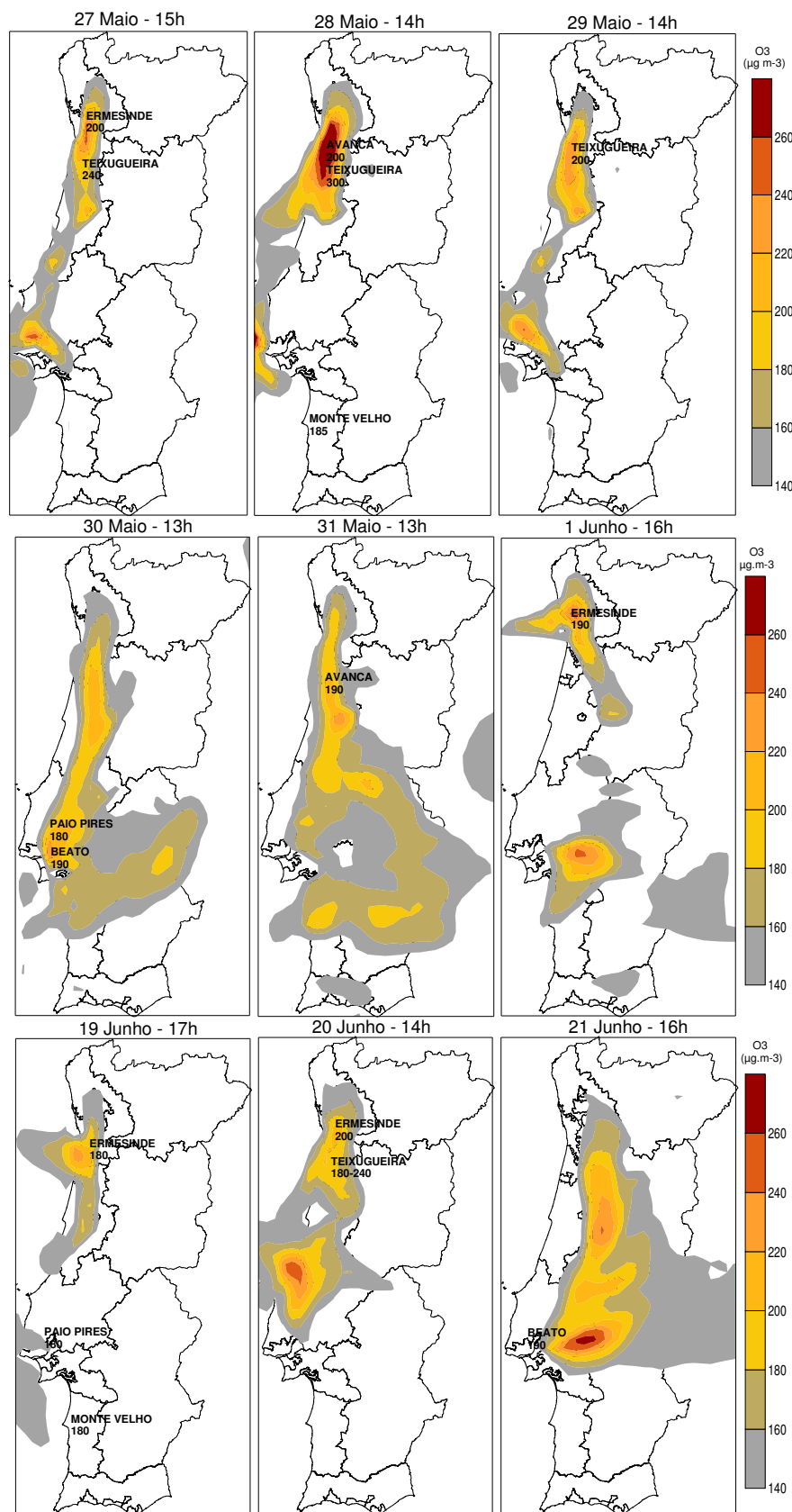


Figura 4.17. Campos superficiais de concentração de O<sub>3</sub> simulados para os dias em que se verificaram excedências ao limiar de informação ao público (180 µg m<sup>-3</sup>), durante o Verão de 2001.

#### 4.2.5 Partículas

A legislação define, para 2001, o valor máximo de  $65 \mu\text{g m}^{-3}$  ( $50 + 15 \mu\text{g m}^{-3}$  de margem de tolerância admitida) para a 35ª máxima média diária de  $\text{PM}_{10}$ . A Figura 4.18 mostra a distribuição espacial desta máxima média diária e o número de excedências deste valor limite, estimadas pelo modelo durante o ano de estudo de 2001, de modo a analisar o cumprimento deste valor limite diário de  $\text{PM}_{10}$ .

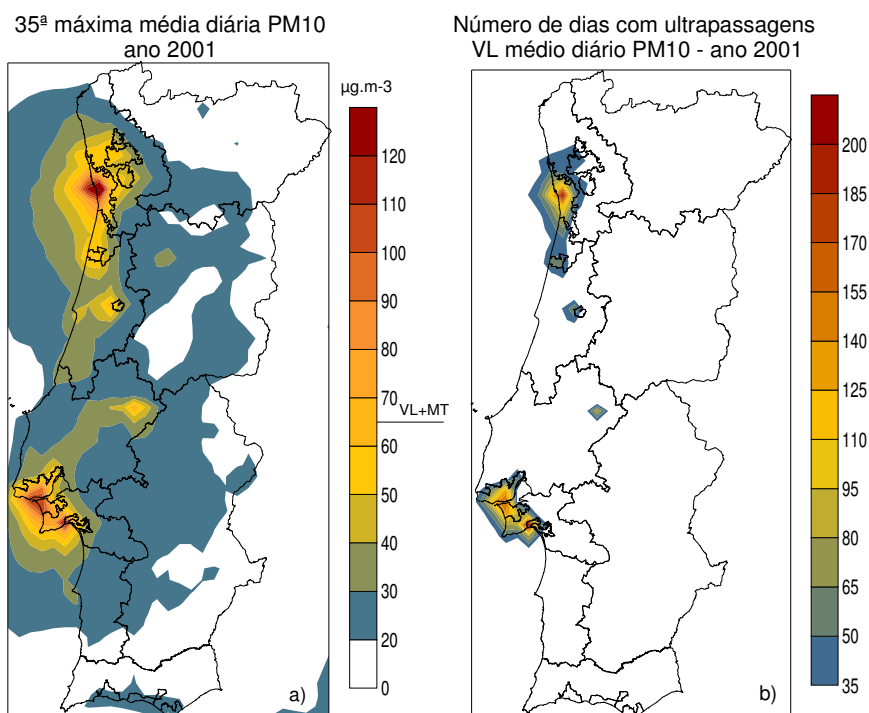


Figura 4.18. Resultados do modelo para a (a) 35ª máxima média diária de  $\text{PM}_{10}$  e para (b) o número de dias com ultrapassagens do valor limite, para 2001.

Os resultados simulados revelam que há ultrapassagem da soma do valor limite com a respectiva margem de tolerância em algumas regiões, nomeadamente sobre as aglomerações do Porto e Lisboa. Aqui chegam-se a atingir médias diárias superiores a  $100 \mu\text{g m}^{-3}$  e incumprimento do valor limite médio diário em mais de 100 dias por ano. Estas elevadas concentrações são uma consequência directa das elevadas emissões de matéria particulada (ver Secção 3.2.3).

De um modo geral, as áreas rurais e interiores apresentam concentrações de fundo de  $\text{PM}_{10}$  baixas, com excepção de algumas zonas influenciadas por fontes emissoras pontuais.

Conclui-se também que, no ano em estudo, apesar das redes regionais de monitorização da qualidade do ar apresentarem uma elevada limitação em termos de representatividade espacial (Figura 2.4), as estações de monitorização que compõem estas redes estão localizadas sobre as duas áreas mais críticas em termos da matéria particulada.

Na Figura 4.19 é apresentado o resultado da modelação para as médias anuais de  $PM_{10}$  e  $PM_{2.5}$ , completando, assim, a análise dos parâmetros definidos pela legislação para a protecção da saúde humana em relação à matéria particulada na atmosfera.

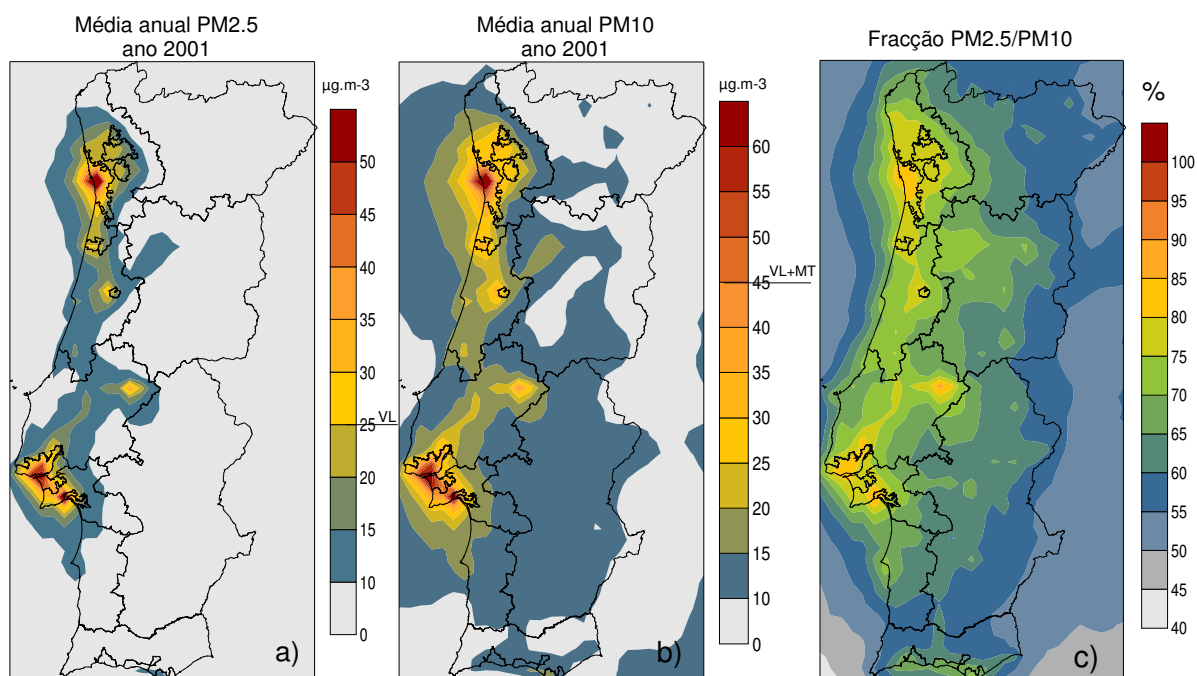


Figura 4.19. Resultados do modelo para as médias anuais de (a)  $PM_{2.5}$  e (b)  $PM_{10}$ , e (c) respectiva fracção, para 2001.

Verificam-se, novamente, ultrapassagens ao valor limite de  $PM_{10}$  acrescido da respectiva margem de tolerância ( $45 \mu g m^{-3}$ ), bem como ao valor máximo de concentração proposto para  $PM_{2.5}$  ( $25 \mu g m^{-3}$ ) nas aglomerações do Porto e Lisboa. A similaridade da distribuição espacial das concentrações médias de  $PM_{2.5}$  e  $PM_{10}$  indica que a maior fracção de matéria particulada terá dimensões muito pequenas, comprovado pela análise da Figura 4.19c, onde se constata que mais de 50% das  $PM_{10}$  têm diâmetros inferiores a  $2,5 \mu m$  ( $PM_{2.5}$ ). Para além disso, nas áreas onde se verifica incumprimento (Lisboa, Porto e Litoral Oeste) a fracção  $PM_{2.5}/PM_{10}$  sobe para 70-80%. A proximidade de fontes emissoras de partículas de pequena dimensão, como o transporte rodoviário e a combustão residencial, deverá ser a justificação a apontar [Van Dingenen *et al.*, 2004]. Espera-se que esta razão esteja sobrestimada no sul do domínio, uma vez que o transporte das poeiras do Norte de África (deserto do Sahara) não foi considerado nesta aplicação.

A magnitude dos valores modelados para as médias anuais de  $PM_{10}$  é similar à encontrada em Espanha e na Europa [Rodriguez *et al.*, 2004; Van Dingenen *et al.*, 2004], quer para as zonas rurais ( $7-10 \mu g m^{-3}$ ), quer para as zonas de fundo urbano ( $30-40 \mu g m^{-3}$ ) e tráfego ( $45-55 \mu g m^{-3}$ ). É de notar que, face à ausência de monitorização de  $PM_{2.5}$  em 2001, não é possível validar os resultados da modelação relativamente a estas partículas, impossibilitando a confirmação desta última análise,



corroborada apenas por estudos pontuais que indicam valores médios anuais de  $23 \mu\text{g m}^{-3}$  e  $24 \mu\text{g m}^{-3}$  para  $\text{PM}_{2.5}$  em Aveiro e Bobadela<sup>10</sup>, respectivamente [Pio *et al.*, 2007; Almeida *et al.*, 2005].

Para além do diagnóstico realizado, foi feita uma análise sazonal para uma melhor compreensão da composição e origem das partículas em Portugal. Na Figura 4.20 são apresentadas as médias das concentrações de  $\text{PM}_{10}$  para o período de Verão e de Inverno.

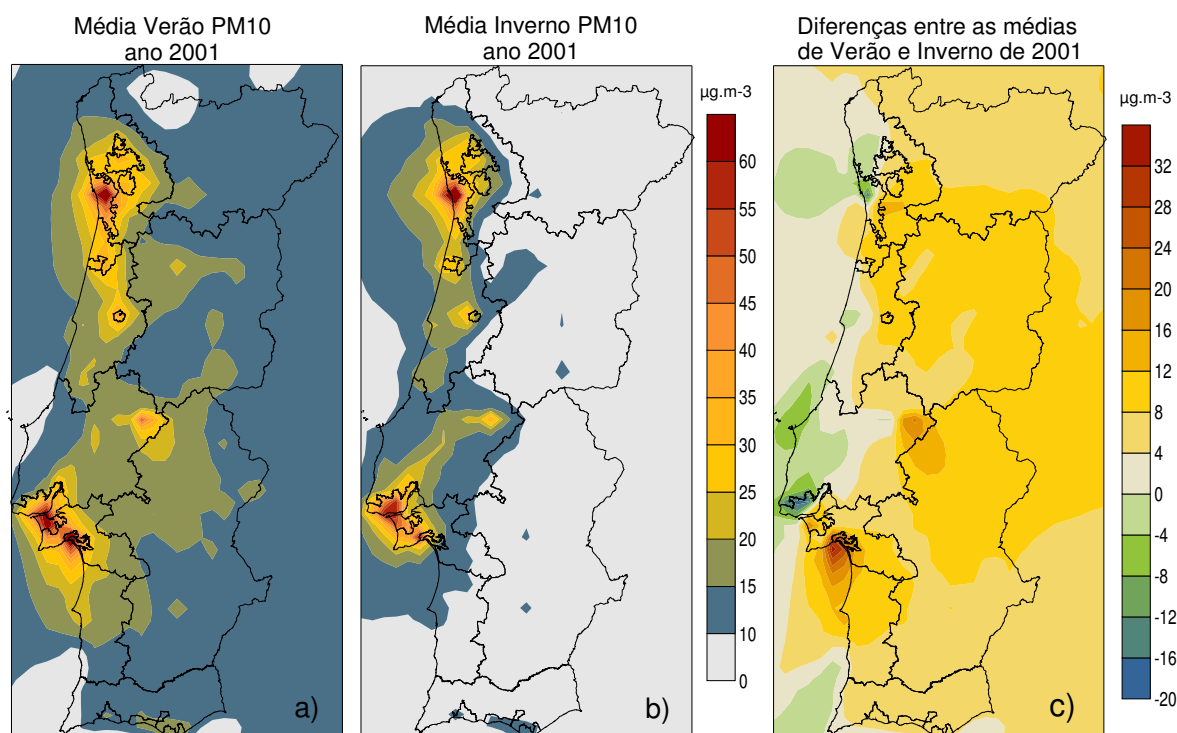


Figura 4.20. Resultados do modelo para as médias de  $\text{PM}_{10}$  de (a) Verão e (b) Inverno, e (c) respectiva diferença, para o ano de 2001.

Os resultados apontam para uma subida das concentrações médias no período de Verão, principalmente nas zonas de fundo mais afastadas dos principais centros urbanos. A Figura 4.20c mostra que nestas áreas urbanas a tendência inverte-se e as concentrações médias são mais baixas no Verão (diferenciais negativos na escala de valores). O facto das concentrações de  $\text{PM}_{10}$  serem mais elevadas nas zonas urbanas no Inverno poderá estar relacionado com um possível aumento das suas emissões directas neste período, nomeadamente das emissões provenientes do aquecimento doméstico. Para além disso, a camada de mistura menos espessa, típica de dias de Inverno frios e com sol, dificulta a dispersão dos poluentes nas zonas poluídas. Por outro lado, o facto das concentrações de fundo de  $\text{PM}_{10}$  serem mais elevadas no Verão sugere uma forte influência do transporte transfronteiriço (por exemplo, poeiras do deserto do Sahara) [Rodriguez *et al.*, 2004], apesar deste ser apenas incluído no modelo através das condições fronteira.

<sup>10</sup> Localidade situada a 10 km a norte de Lisboa.

#### 4.2.6 Aerossol orgânico secundário

São apresentados, na Figura 4.21, os resultados obtidos para a concentração do aerossol orgânico secundário (SOA), definido como a parte orgânica do aerossol atmosférico e formado pela oxidação de compostos orgânicos voláteis [Seinfeld e Pandis, 1998].

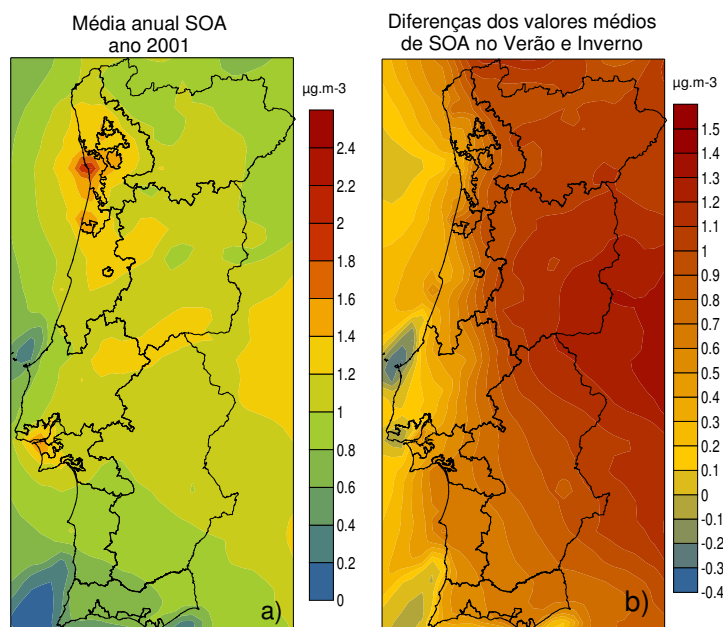


Figura 4.21. Resultados do modelo para a média anual (a) do aerossol orgânico secundário e (b) diferenças relativas obtidas entre o período de Verão e Inverno, para 2001.

Estudos apontam para que a parte orgânica do aerossol atmosférico constitua cerca de 20-60% da massa total de  $\text{PM}_{2.5}$  [IIASA, 2000; Querol *et al.*, 2001], dependendo da hora do dia e da estação do ano, apresentando valores baixos no Inverno devido à reduzida actividade fotoquímica [Dusek, 2000]. A distribuição espacial da média anual de SOA simulada (Figura 4.21a) está de acordo com o facto do SOA resultar da oxidação atmosférica de COV (antropogénicos e biogénicos) e da conversão gás-partícula, ao indicar concentrações elevadas em zonas remotas, resultante de processos de transporte e difusão [Liousse *et al.*, 1996]. Esta distribuição espacial está, ainda, de acordo com os resultados simulados de  $\text{PM}_{2.5}$ , apresentando valores mais elevados nas zonas de maior concentração de partículas finas (Figura 4.19) e em particular na região do Porto. Os valores mais elevados de SOA no Verão (Figura 4.21b) confirmam ainda a importância dos fenómenos de oxidação fotoquímica na sua origem, corroborados por medições experimentais de 68-78% de carbono orgânico no Verão [Castro *et al.*, 1999]. As pequenas diferenças na costa ocidental (sobretudo nas áreas urbanas de Lisboa e Porto) poderão reflectir as elevadas emissões locais, provenientes, por exemplo, da queima de biomassa do aquecimento doméstico, aliadas a fraca dispersão atmosférica existente no Inverno em áreas urbanas. Estas diferenças confirmam as várias origens de SOA, dependendo da época do ano [Pio *et al.*, 2007].

### 4.3 Análise integrada da qualidade do ar: 2001- 2006

De modo a conhecer e entender a evolução da qualidade do ar em Portugal Continental durante os vários anos simulados (2001 a 2006), foi ainda realizada uma análise integrada da qualidade do ar em termos dos principais poluentes atmosféricos, nomeadamente  $O_3$  e  $PM_{10}$ . Optou-se por analisar e comparar 2001, 2004 e 2006, por se tratarem de anos intercalares e porque 2003 e 2005 foram anos com características excepcionais em termos de qualidade do ar devido à elevada ocorrência de incêndios florestais. Por este motivo, e pelas particulares condições meteorológicas, o ano de 2003 será alvo de estudo separado, no Capítulo 5.

É de salientar que o inventário de emissões usado nas aplicações de 2004 e 2006 foi idêntico e reportou-se ao ano de 2003, correspondente à última actualização dos inventários EMEP (para o domínio europeu) e INERPA (para Portugal), respectivamente. Para 2001 usou-se o inventário disponível para este mesmo ano. De seguida é apresentada a comparação entre os resultados obtidos para os três anos, de acordo com os parâmetros definidos pela legislação como indicadores da qualidade do ar a reportar à Comissão Europeia.

#### 4.3.1 Análise dos resultados de $O_3$

No caso do ozono, a comparação relativa às médias octo-horárias anuais (Figura 4.22) não regista diferenças significativas nos padrões de distribuição, apesar de um ligeiro aumento deste valor médio em 2006 nas plumas urbanas de Lisboa e Porto. Em termos de médias octo-horárias de fundo poderá haver uma tendência para o seu aumento, apesar dos 3 anos de estudo não serem suficientes para sustentar esta conclusão.

Relativamente aos mapas de AOT40 (Figura 4.23), as diferenças entre os três anos em estudo são mais significativas, verificando-se uma diminuição do valor de AOT40 a sudeste da região metropolitana do Porto em 2004, mas o retorno deste valor elevado em 2006. Há a salientar os valores elevados de AOT40 em zonas limítrofes de Portugal, mais pronunciados em 2004 e 2006. Estes valores cumulativos elevados estão directamente relacionados com as condições fronteira usadas, provenientes da simulação à escala europeia, apontando a necessidade de uma análise mais detalhada sobre as concentrações de  $O_3$  de fundo e limítrofes de Portugal.

Por outro lado, estes resultados estão de acordo com a análise da monitorização realizada na Secção 2.3.2, que revela um incumprimento do valor alvo para a protecção da saúde humana nas várias estações analisadas, para além de um aumento deste valor médio octo-horário ao longo dos vários anos. Em termos de AOT40, os valores registados nessas estações não são superiores ao valor alvo legislado, porém, nenhuma das estações analisadas se situa nas áreas com valores de AOT simulados mais elevados.

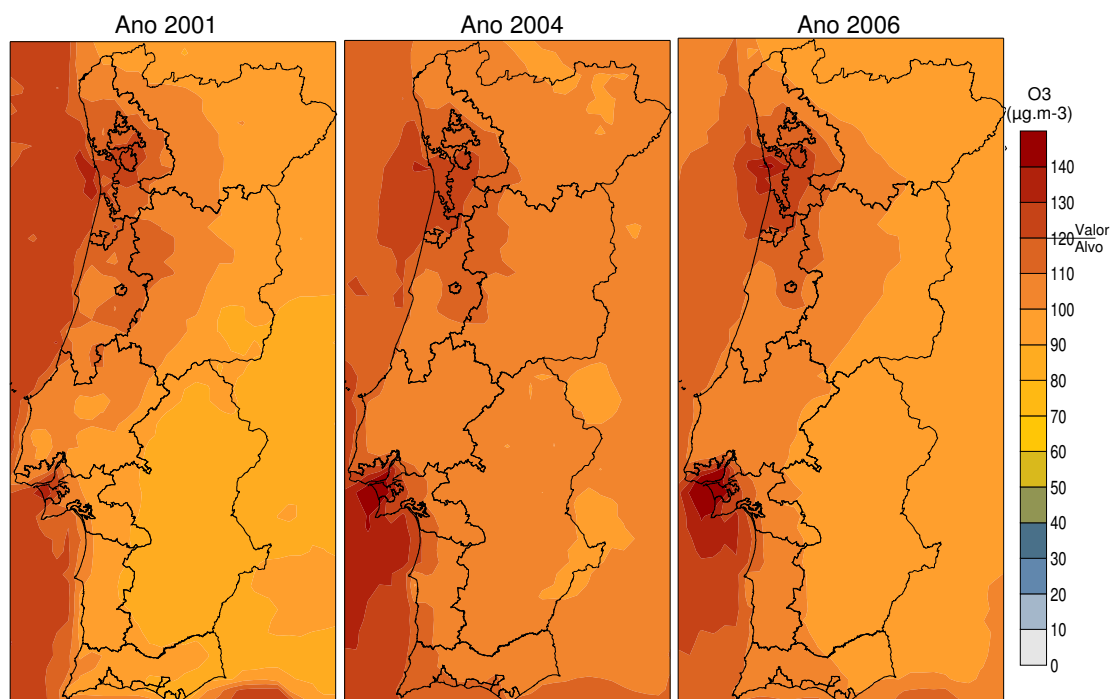


Figura 4.22. Resultados da modelação para a 26ª máxima média móvel octo-horária diária de  $O_3$ , para 2001, 2004 e 2006.

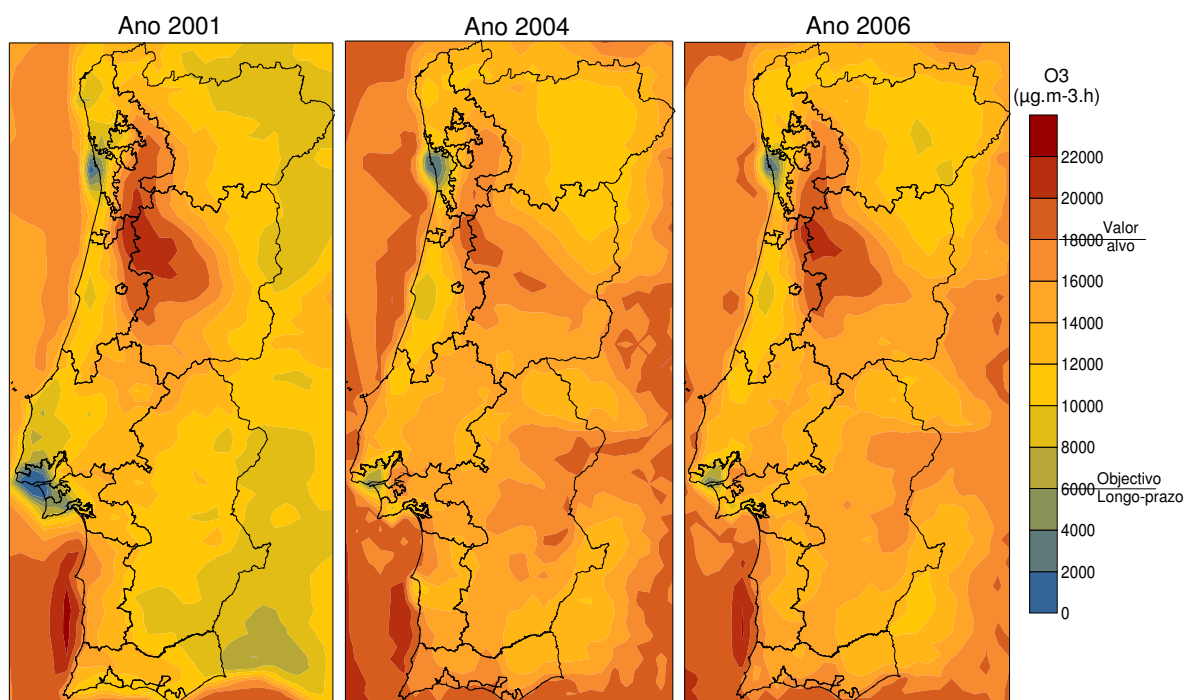


Figura 4.23. Resultados da modelação para o AOT40, relativo ao  $O_3$ , para 2001, 2004 e 2006.

### 4.3.2 Análise dos resultados de $PM_{10}$

Na Figura 4.24 são comparados os resultados do valor limite diário de  $PM_{10}$  para a protecção da saúde humana, para 2001, 2004 e 2006.

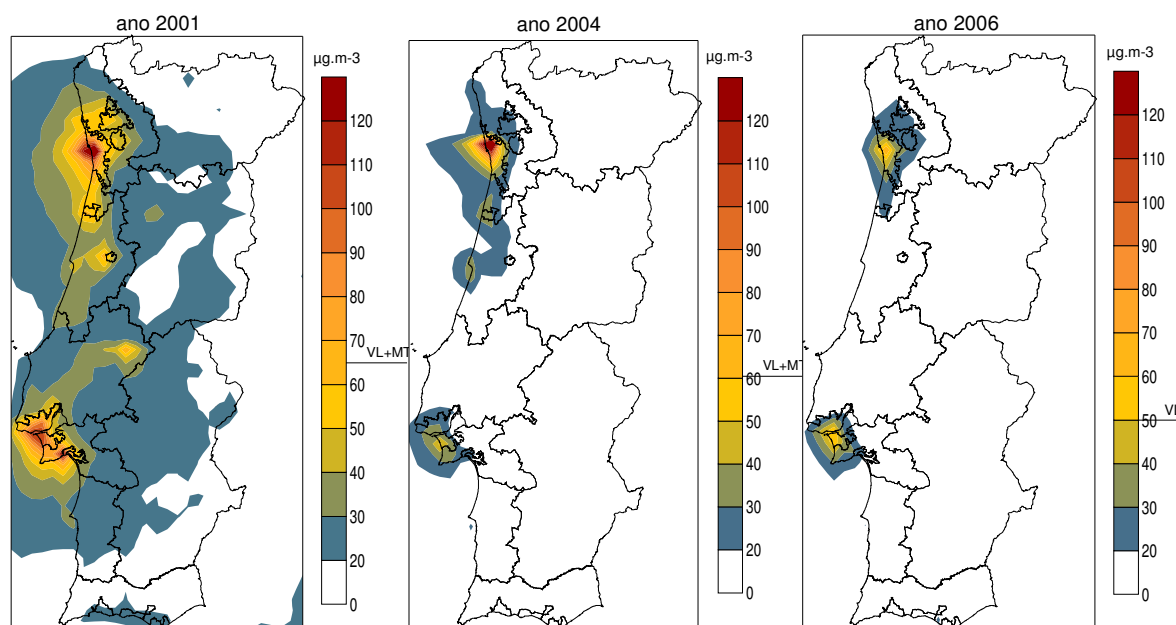


Figura 4.24. Resultados da modelação para a 35ª máxima média diária de  $PM_{10}$  para 2001, 2004 e 2006.

Os mapas apontam para concentrações médias diárias consideravelmente mais elevadas em 2001. Para além disso, as áreas mais críticas (média diária de  $PM_{10} > 50 \mu g m^{-3}$ ) apresentam uma extensão muito superior à registada em 2004 e 2006, a qual se confina apenas às regiões urbanas do Porto e Lisboa. Refira-se, que, em 2006, quando já não há margem de tolerância para o cumprimento do valor limite, se verifica ainda o incumprimento deste nas áreas urbanas de Lisboa e Porto.

Idêntico comentário deve ser feito relativamente à Figura 4.25 onde se observa a comparação entre a média anual de  $PM_{10}$  simulada para 2001, 2004 e 2006. Também aqui se revelam valores médios anuais mais elevados no ano de 2001 e com uma maior extensão das áreas mais afectadas. Para além disso, verifica-se uma diminuição gradual das concentrações de  $PM_{10}$  ao longo dos três anos.

Apesar da redução das concentrações de  $PM_{10}$  no ar ambiente, continua a existir, nas duas principais áreas metropolitanas, excedência do valor limite anual em 2006 ( $40 \mu g m^{-3}$ ), ano para o qual já não há margem de tolerância para o seu cumprimento.

Estes resultados corroboram a análise dos dados de monitorização da Secção 2.3.3, onde se observa, em todas as estações, um decréscimo acentuado dos níveis médios anuais de  $PM_{10}$  a

seguir a 2001, apesar do incumprimento dos valores limite em termos de médias diárias ao longo dos vários anos.

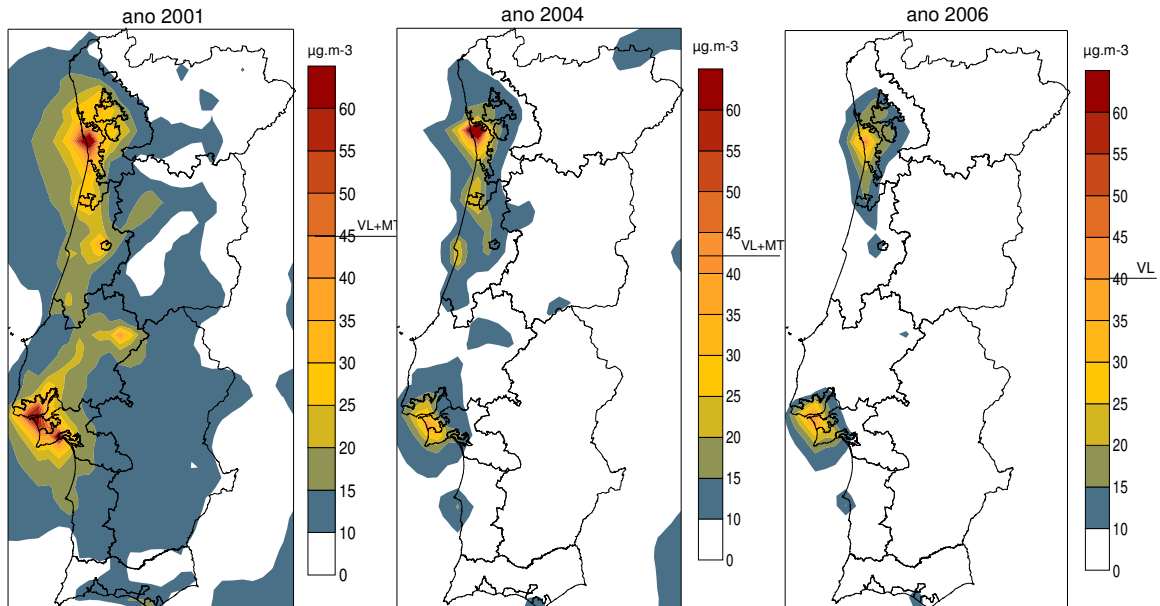


Figura 4.25. Resultados da modelação para a média anual de PM<sub>10</sub> para 2001, 2004 e 2006.

Em resumo, e apesar desta análise integrada compreender apenas três anos, observa-se uma redução nas concentrações urbanas de PM<sub>10</sub>, entre 2001 e 2006, apesar do aumento das concentrações de fundo e fronteira de O<sub>3</sub>.

Estes resultados poderão, no entanto, reflectir apenas condições específicas (por exemplo, meteorológicas) dos anos 2004 e 2006 e não necessariamente uma tendência. Para além disso, a similaridade dos resultados relativos aos anos 2004 e 2006 é justificada pelo uso do mesmo inventário de emissões (referente ao ano 2003), o qual, tal como verificado na Secção 3.2.3.2, apresenta valores mais baixos comparativamente com o ano 2001.

Para que estas conclusões possam ser mais bem fundamentadas, seria necessário realizar esta análise integrada com um maior conjunto de anos e de preferência com um inventário de emissões adequado ao período de simulação.

## 4.4 Avaliação do impacto dos Tectos de Emissões Nacionais

A Directiva Comunitária 2001/81/EC<sup>11</sup>, que visa o cumprimento até 2010 do PTEN para compostos acidificantes, eutrofizantes e precursores de ozono troposférico (SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, COVNM e NH<sub>3</sub>), constitui uma das “pedras basilares” da nova estratégia para a Qualidade do Ar [COM(2005) 446]. De acordo com esta Directiva, os Estados-Membro (EM) devem desenvolver e implementar um programa nacional de redução e limitação das emissões dos poluentes atmosféricos referidos.

Os valores do PTEN foram definidos para cada EM de modo a distribuir as medidas de redução de emissões, entre os vários estados, com o menor custo global [Amann, 2004].

Neste contexto, o sistema de modelação numérica, previamente validado, foi usado como ferramenta para avaliar o impacto na qualidade do ar do cumprimento dos tectos de emissões estabelecidos para 2010, apresentando-se ainda uma avaliação do seu progresso/eficácia baseada nos cenários de redução intermédios, definidos para o ano 2005. Este cenário intercalar foi definido numa tentativa de facilitar a implementação das medidas e o cumprimento das metas de 2010, atendendo a que as reduções previstas para 2010 são consideravelmente elevadas. Este ano (2005) não foi, porém, validado com dados observados, uma vez que se tratou de um ano particularmente afectado por incêndios florestais, servindo, neste estudo, apenas como cenário intercalar para avaliação da eficácia das medidas mitigadoras de emissões.

Foram ainda testados 2 cenários distintos (alto e baixo), estabelecidos para cada ano, de acordo com indicadores macro-económicos sectoriais. O cenário baixo corresponde ao menor crescimento do Produto Interno Bruto, em oposição ao cenário alto, que pressupõe um crescimento mais rápido da economia com uma taxa de investimento maior [IA, 2002a; 2002b].

As emissões totais nacionais dos vários cenários, constantes do PTEN, foram fornecidas pela APA, tendo sido desagregadas espacialmente para a malha usada na simulação numérica (10 x 10 km<sup>2</sup>), através de uma metodologia “top-down” [Miranda *et al.*, 2006].

O sistema de modelação foi aplicado novamente, primeiro à escala europeia e depois à escala nacional, recorrendo à técnica de “nesting” e usando as mesmas resoluções horizontais e verticais definidas na Secção 3.2.2. O ano de 2001, anteriormente simulado, serviu como ano de referência para a avaliação do impacto obtido pelos cenários PTEN na qualidade do ar para 2005 e 2010, tendo sido mantidas as condições meteorológicas simuladas para 2001, e alterando apenas os dados de emissões consoante o cenário a analisar.

---

<sup>11</sup> Transposta para a ordem jurídica interna pelo Decreto-Lei n.º 193/2003 de 22 de Agosto

#### 4.4.1 Análise dos cenários de emissões

Na Tabela 4.7 apresentam-se as emissões totais nacionais, estimadas para o ano de base 2001 e para os cenários 2005 e 2010, em comparação com os tectos de emissão nacionais estabelecidos para 2010.

Tabela 4.7. Comparação entre as emissões nacionais estimadas para o ano de base 2001 e para os cenários 2005 e 2010 e os tectos de emissão nacional definidos na Directiva PTEN para Portugal.

Cenários/poluentes (kt ano <sup>-1</sup> )	SO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	COVNM	NH <sub>3</sub>
Ano de base (2001)	242	383	468	89
Cenário baixo 2005	231	274	240	n.d.
Cenário alto 2005	223	275	252	n.d.
Cenário baixo 2010	139	220	200	85
Cenário alto 2010	145	232	222	85
<b>Tectos de Emissão Nacional 2010</b>	<b>160</b>	<b>250</b>	<b>180</b>	<b>90</b>

n.d.: dados não disponíveis

Os cenários de 2005 permitem a redução das emissões dos diferentes poluentes, sendo estas mais significativas para os COVNM (cerca de 50%) e menores para o SO<sub>2</sub> (apenas 5%). Em 2010 prevêem-se reduções ainda mais elevadas para todos os poluentes, que vão dos 40 aos 60%, à excepção do NH<sub>3</sub> que apresenta reduções menores (cerca de 5%). Apesar de, em 2005, os valores das emissões serem ainda elevados, em 2010 serão cumpridos os TEN de todos os poluentes, à excepção dos COVNM. Planeia-se um esforço adicional de redução de 10-20%, com medidas afectando o sector doméstico, da construção civil e da extracção e distribuição de combustível [IA, 2004]. A Tabela 4.7 evidencia ainda que as diferenças entre os dois cenários, alto e baixo, não são significativas no que se refere aos valores de emissão, cujo diferencial máximo é de 10%.

Na Figura 4.26 apresentam-se as contribuições de cada sector de actividade, nos anos analisados, para as emissões nacionais de NO<sub>x</sub> e COVNM.

Os processos de combustão, incluindo a produção de electricidade, a combustão industrial e os transportes rodoviários, são os que apresentam maior peso nas emissões de NO<sub>x</sub>. Para as emissões de COVNM têm importantes contribuições os processos de produção, a extracção e distribuição de combustíveis, a aplicação de solventes e o transporte rodoviário. No que respeita à evolução prevista nos cenários, para o NO<sub>x</sub>, esperam-se aumentos nas emissões associadas à combustão residencial e industrial, largamente compensadas pela redução prevista nas emissões da produção de energia e muito especialmente do transporte rodoviário. Para os COVNM, prevêem-se reduções significativas (cerca de 50 a 60%) nas emissões de sectores importantes, como processos de produção, extracção e distribuição de combustíveis e transporte rodoviário. No entanto, são expectáveis aumentos nas emissões da produção de energia, combustão industrial e uso de solventes. A diversidade das fontes



de emissão de COVNM dificulta a identificação de um grupo de fontes chave e com elevado potencial de redução das emissões, sendo por isso complexa a definição de medidas de redução adicionais para este poluente.

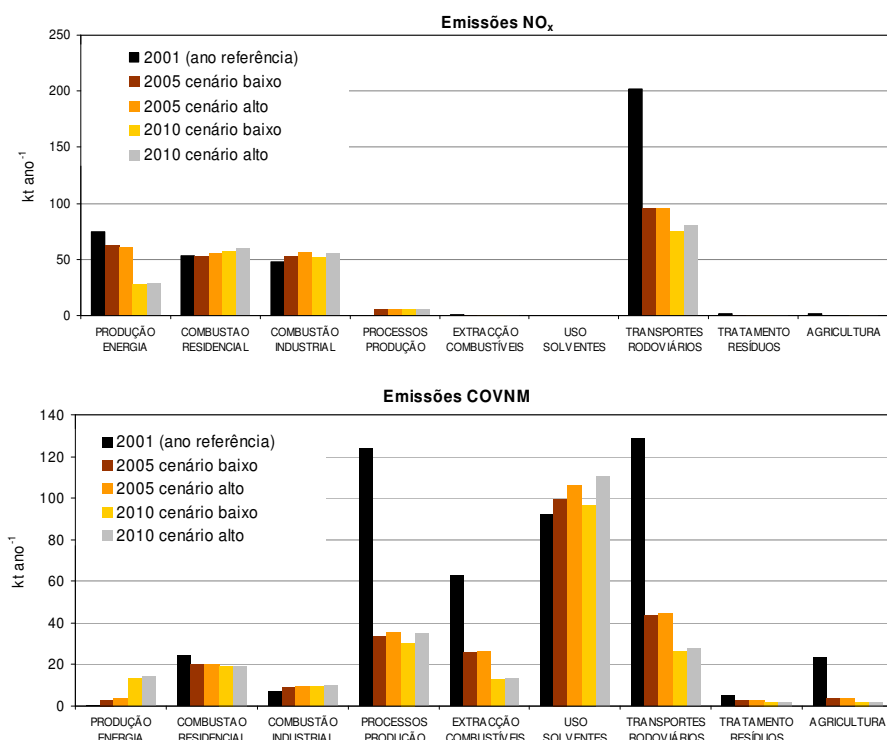


Figura 4.26. Comparação das emissões de NO<sub>x</sub> e COVNM, para o ano de referência e para os cenários de emissões, nos vários sectores de actividade.

Finalmente importa referir o elevado grau de incerteza dos cenários de emissão apresentados [Hanna *et al.*, 1998]. Este deve-se sobretudo às incertezas associadas ao inventário do ano de base e à eficiência dos actuais instrumentos políticos, bem como os de implementação futura e, por conseguinte, às projecções do potencial de redução de emissões de cada medida.

#### 4.4.2 Impacto dos cenários de emissões na qualidade do ar

A avaliação do impacto na qualidade do ar dos cenários de emissões do PTEN baseou-se na comparação entre a simulação de referência (ano 2001) e a realizada tendo em conta estes cenários. A título ilustrativo apresentam-se na Figura 4.27 os resultados obtidos para 2001 e as diferenças entre os cenários baixos de 2005 e 2010 e o ano de referência, relativamente ao valor limite de NO<sub>2</sub> para a protecção da saúde humana.

Verifica-se uma melhoria significativa na qualidade do ar resultante das medidas de redução adoptadas, especialmente no cenário de 2010 onde as diferenças em relação ao ano de base atingem os 50% nas duas principais zonas urbanas. As simulações sugerem que em 2010 não ocorrerão excedências ao valor limite horário de protecção da saúde para este poluente ( $200 \mu\text{g m}^{-3}$ ).

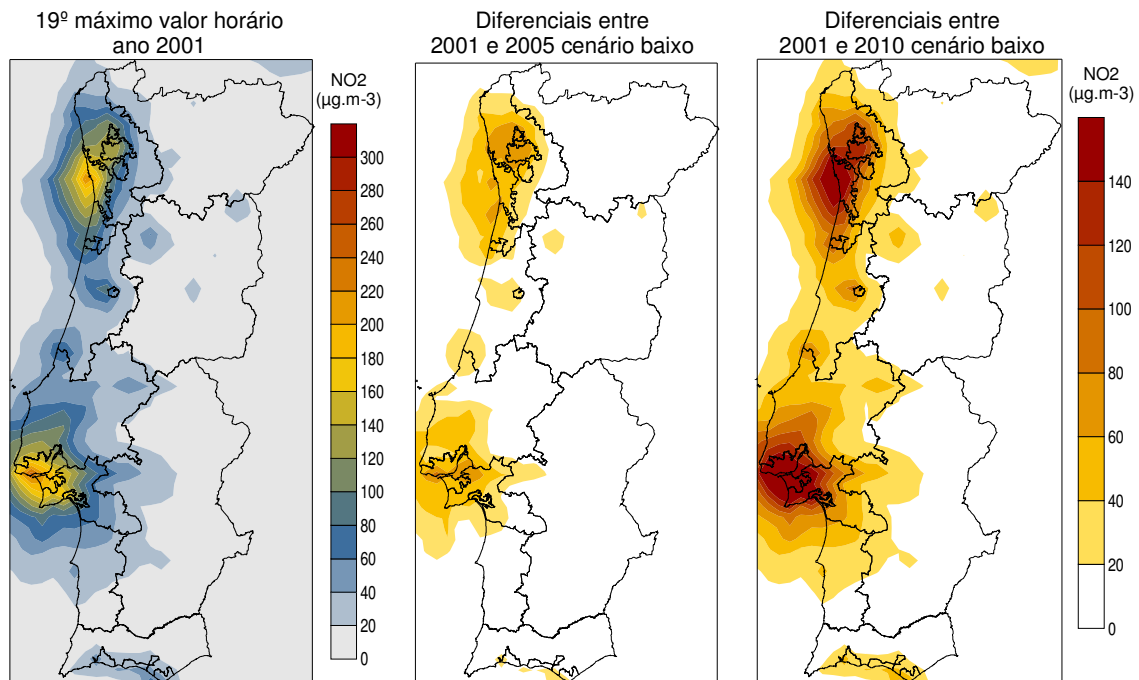


Figura 4.27. Resultados de modelação para o valor limite horário de  $\text{NO}_2$  para a protecção da saúde humana para 2001 e diferenças entre o ano de base e os cenários baixos de 2005 e 2010.

Para o caso do ozono, apresenta-se, na Tabela 4.8, o número de excedências aos valores legislados (limiar de informação e AOT40) estimadas para o ano de referência e para os cenários de 2005 e 2010. Verificam-se decréscimos importantes no número total de valores médios horários superiores ao limiar de informação, quer em 2005 (redução de 60%), quer em 2010 (redução de 90%). As reduções são ainda mais significativas quando se considera o número de excedências ao valor alvo definido para AOT40. Os resultados evidenciam a semelhança entre os resultados obtidos para os cenários alto e baixo, tal como se tinha verificado para as emissões.

Tabela 4.8. Número de excedências ao limiar de informação do ozono ( $180 \mu\text{g m}^{-3}$ ) e ao valor de AOT40 ( $18000 \mu\text{g m}^{-3} \text{h}^{-1}$ ) simulados para 2001, 2005 e 2010.

	2001 Ano de referência	2005		2010	
		Cenário baixo	Cenário alto	Cenário baixo	Cenário alto
Número de células da malha com concentração de $\text{O}_3 > 180 \mu\text{g m}^{-3}$	668	269	266	72	63
Número de células da malha com $\text{AOT40} > 18000 \mu\text{g m}^{-3} \text{h}^{-1}$	133	11	8	2	0

Na Figura 4.28 apresenta-se a distribuição espacial obtida para o AOT40 no ano de referência e nos cenários baixos relativos a 2005 e 2010. É notória a melhoria da qualidade do ar esperada nos dois cenários, em especial para 2010, para o qual já não se prevê ultrapassagens do valor alvo de AOT40. Realça-se que a melhoria da qualidade do ar não é uniforme em todo o domínio de simulação, existindo zonas para as quais os níveis de ozono não variam ou, inclusivé, sofrem um agravamento relativamente ao ano de referência, nomeadamente nas zonas urbanas de Lisboa e Porto. Este comportamento pode ser explicado pelos mecanismos fotoquímicos do ozono troposférico [Seinfeld e Pandis, 1998], estando o aumento dos níveis de ozono associado à diminuição das emissões dos seus compostos precursores ( $\text{NO}_x$  e COVNM).

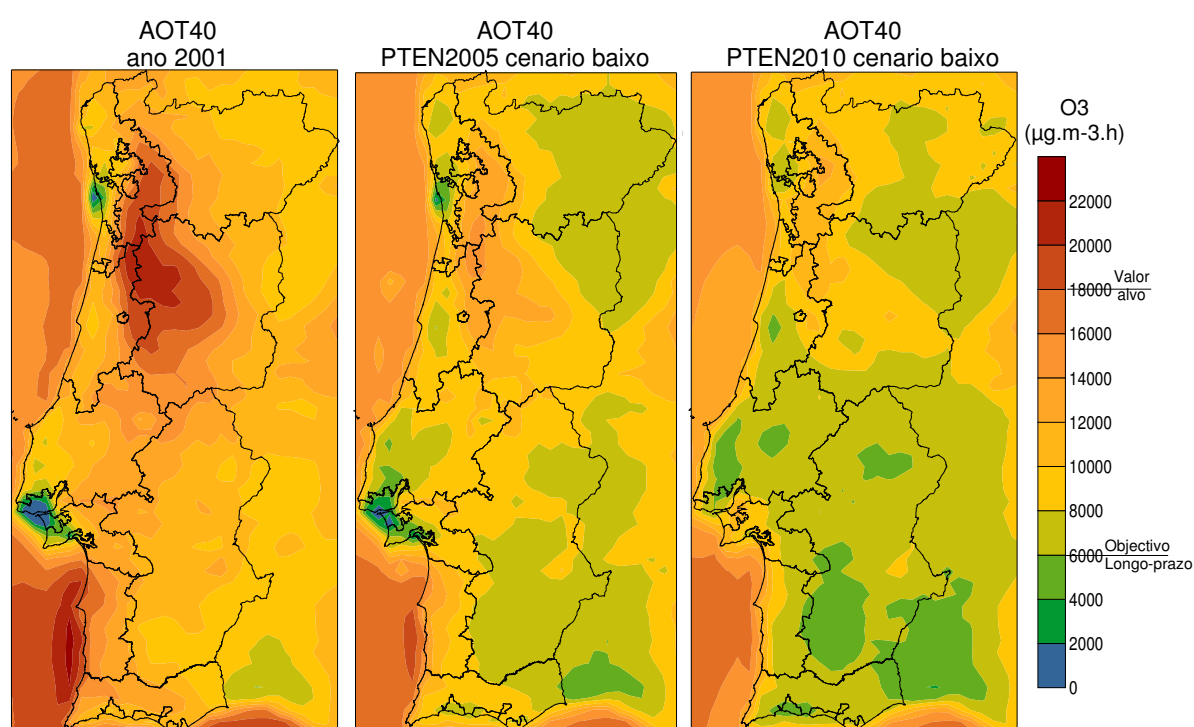


Figura 4.28. Resultados de simulação do AOT40, relativo ao ozono, para o ano de referência de 2001 e para os cenários baixos de 2005 e 2010.

Os resultados deste estudo indicam que os cenários de redução previstos pelo PTEN irão possibilitar uma melhoria significativa da qualidade do ar em Portugal Continental para o horizonte temporal de 2010. De acordo com as simulações, prevê-se um decréscimo dos níveis de ozono troposférico, especialmente na envolvente às áreas urbanas de Lisboa e Porto, onde ocorreram em 2001 excedências aos limiares de informação e alerta (ver Figura 4.17). A comparação das estimativas da simulação de dois cenários de redução de emissões, baixo e alto, não evidencia diferenças significativas devido à semelhança dos inventários de emissões associados. Os resultados reforçam, assim, a importância de se incluir o PTEN numa estratégia nacional de gestão da qualidade do ar.

## Chapter V.

### The impact of forest fire emissions on air quality

Each summer season wild land forest fires burn a considerable area of the south European landscape. Summer 2003 was one of the most severe fire seasons experienced during the last decades in southern Europe and, in particular, over Portugal, due to persistent extreme fire conditions [Luterbacher *et al.*, 2004]. As a consequence, unusual air pollutants concentrations were registered in several monitoring stations.

In this sense, the year 2003 was analysed separately and used as study case to evaluate the impact on air quality of forest fire emissions. The MM5-CHIMERE modelling system was applied over the mainland Portugal domain using the same configuration and physical options applied for the long-term air quality simulations, first without considering forest fire emissions and second adding these hourly estimated emissions at an injection altitude above 100 meters.

The forest fire emissions were estimated using a simplified methodology, which includes emission factors for each pollutant ( $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{CH}_4$ , NMVOC,  $\text{PM}_{2.5}$ ,  $\text{PM}_{10}$  and  $\text{NO}_x$ ), burning efficiency, fuel loads and burned area (in terms of forest types and shrubs) [Martins, 2007]. Emission factors were based on specific southern European emissions factors, considering the most suitable for Mediterranean ecosystems and for the Portuguese land use types [Miranda, 2004]. The selected fuel load was based on the National Forest Inventory [DGF, 2001]. The result of these emissions estimation indicates that the fraction of forest fire emissions regarding the annual total of anthropogenic emissions represents a significant percentage for major pollutants, principally for CO (40%) and PM (20-30%).

Model results show a significant performance improvement when forest fires are taken into account and allow quantifying differences on the levels of pollutants when forest fires occur.  $\text{PM}_{10}$  and  $\text{O}_3$  values can reach differences on the order of 30% for specific monitoring sites, enhancing the importance and the influence of this type of emissions in the local to regional air quality. Chamusca

station (Santarém district), which usually registers low pollution levels, is an illustrative example of this influence, with an increase of model performance of 10-15% when forest fire emissions are included.

Nevertheless, regarding ozone, there is a substantial number of stations where the impact of forest fires is overestimated, and the inclusion of precursor emissions is not improving model performance. This could be explained by the presence of aerosol emissions that significantly alter atmospheric radiative properties and decreases photolysis rates [Hodzic *et al.*, 2005] that are not taken into account in the CHIMERE model simulation.

The spatial representation of the simulations differential shows different impacts of forest fires on the O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub> concentration maps. In fact, the largest enhancement in PM<sub>10</sub> concentrations is confined within a 200 km area around the fire source locations, in opposition to the O<sub>3</sub> secondary pollutant that affects areas more distant than 200 km from the fire ignition point in most cases.

## Capítulo V

### 5. O impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar

O Verão de 2003 pautou-se, por toda a Europa e, em particular, em Portugal, por uma intensa onda de calor associada a condições extremas de temperatura e secura [Luterbacher *et al.*, 2004], que resultaram num número excepcionalmente elevado de incêndios florestais na Península Ibérica [Barbosa *et al.*, 2004]. Por esta razão, a avaliação do ano 2003 focalizou-se no impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar, tendo sido necessário, para tal, efectuar a estimativa das emissões libertadas e a sua posterior integração na simulação numérica. O presente capítulo é iniciado com o estado-da-arte nesta matéria, seguido da estimativa das emissões dos fogos para o Verão de 2003 em Portugal e do desenvolvimento do módulo numérico para incorporação destas emissões no sistema de modelação da qualidade do ar. Os resultados obtidos permitiram avaliar o impacto destes incêndios na qualidade do ar respirado em Portugal.

#### 5.1 O impacto dos incêndios florestais

Os incêndios florestais, ao libertarem para a atmosfera grandes quantidades de matéria particulada e gases precursores de ozono, provocam modificações, quer ao nível da química atmosférica, quer em termos das suas propriedades radiativas [Wotawa e Trainer, 2000; McKeen *et al.*, 2002]. Estudos recentes sugerem que os efeitos radiativos, directos e indirectos, de aerossóis da queima de biomassa possuem um papel muito importante no balanço radiativo da Terra [IPCC, 2001], prevendo-se que estes efeitos aumentem no futuro devido a fenómenos de aquecimento global [Schar *et al.*, 2004; Meehl e Tebaldi, 2004; Carvalho, 2002], apesar de representarem uma das principais fontes de incerteza em cenários climáticos futuros. Para além disso, os incêndios florestais contribuem para a degradação da qualidade do ar, tanto à escala local como regional, constituindo uma ameaça para a saúde humana [Bowman e Johnston, 2005]. De facto, vários episódios de

poluição atmosférica associados a incêndios florestais foram já identificados em todo o globo. Recentemente, Phuleria *et al.* [2005] reportaram um aumento, num factor 3-4, de concentrações de PM<sub>10</sub> em Los Angeles associado aos grandes fogos florestais que ocorreram no Sul da Califórnia em Outubro de 2003.

Apesar desta evidência, as emissões provenientes dos fogos florestais, e seus efeitos subsequentes, são raramente tidos em conta e incluídos nos modelos de qualidade do ar [Seigneur, 2005], para além de alguns estudos americanos [Pouliot *et al.*, 2005; Wang *et al.*, 2006; Ferguson *et al.*, 2001] e outros de âmbito nacional sobre episódios de incêndios à escala local e urbana [Borrego *et al.*, 1999; Miranda, 2004; Valente *et al.*, 2007]. Só recentemente foi feita a primeira abordagem a este tema à escala regional e de longo prazo [Hodzic *et al.*, 2006b; Hodzic *et al.*, 2007]. Tal facto deve-se sobretudo à dificuldade em estimar as emissões libertadas pelos incêndios florestais com um baixo nível de incerteza [Giglio *et al.*, 2006], já que o seu cálculo envolve a detecção da origem dos fogos, sua variabilidade espaço-temporal, o conhecimento dos factores de emissão relativos a cada cobertura vegetal e ainda a determinação da altura de sobrelevação da pluma de fumo. A detecção remota tem sido usada para o reconhecimento dos incêndios e para a estimativa da área ardida. Porém, limitações associadas a esta detecção (por exemplo, cobertura nublosa) implicam grandes incertezas na determinação da real área ardida e na intensidade do fogo [Giglio *et al.*, 2006]. Por outro lado, os modelos de qualidade do ar necessitam de informação detalhada (horária) sobre as emissões de poluentes libertadas e as parametrizações específicas para determinar a altura de sobrelevação e a distribuição vertical correcta das emissões [Hodzic *et al.*, 2007]. A abordagem usada por Martins [2007] foi adoptada neste estudo para estimar o impacto na qualidade do ar dos grandes incêndios florestais ocorridos no Verão de 2003 em Portugal (Figura 5.1), modificando o sistema de modelação MM5-CHIMERE de modo a incluir as emissões horárias estimadas.

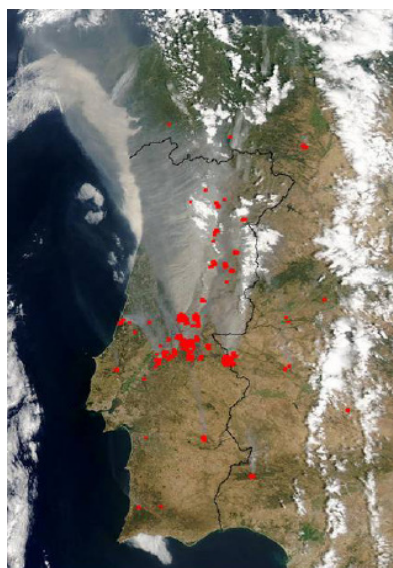


Figura 5.1. Imagem do satélite AQUA obtida em 3 de Agosto de 2003 [NASA, URL10].

## 5.2 Estimativa das emissões de incêndios florestais - ano 2003

Os principais poluentes que resultam de fogos florestais e considerados neste estudo, dada a sua importância no processo de simulação da qualidade do ar, são: CO, CH<sub>4</sub>, COVNM, PM<sub>2,5</sub>, PM<sub>10</sub> e NO<sub>x</sub>. Para além destes, foram estimadas as emissões de CO<sub>2</sub> apesar de se tratar de um poluente quimicamente não reactivo, de modo a avaliar a contribuição dos fogos para o total das emissões antropogénicas de CO<sub>2</sub> libertadas em Portugal.

As emissões dos referidos poluentes, resultantes de fogos florestais, dependem e devem ser determinadas com base na eficiência de combustão, no tipo de vegetação (carga combustível), nos factores de emissão relativos a cada poluente e na área ardida em cada uma das ocorrências. Genericamente, a estimativa da emissão de um determinado poluente pode ser calculada por:

$$E_i = FE_i \times CC \times EC \times A$$

onde,

$E_i$  – emissão do poluente  $i$  (g);

$FE_i$  – factor de emissão para o poluente  $i$  (g kg<sup>-1</sup>);

CC – carga combustível ou massa de combustível por unidade de área (kg m<sup>-2</sup>);

EC – eficiência global de combustão (%);

A – área ardida (m<sup>2</sup>).

A Figura 5.2 representa esquematicamente a metodologia descrita, que se baseia no modelo EMISPREAD – “Forest Fire Emissions Model for South-European Forest” [Miranda *et al.*, 2005a], agrupando os dados necessários segundo três vertentes fundamentais. Esta metodologia foi aplicada a cada uma das 247 ocorrências registadas durante o Verão de 2003 e para cada um dos sete poluentes considerados. Os dados relativos às três vertentes desta metodologia são descritos em seguida.

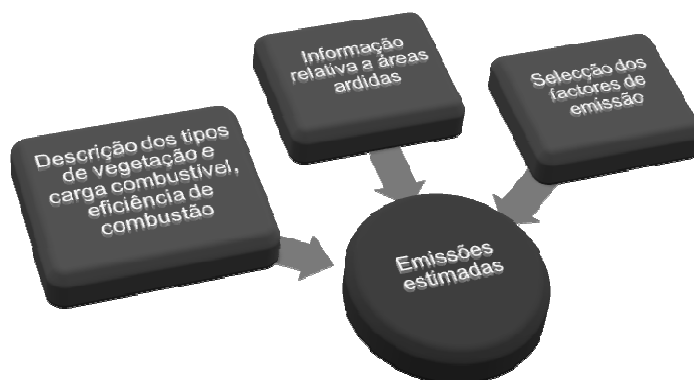


Figura 5.2. Metodologia de cálculo de emissões de incêndios florestais.



### 5.2.1 Informação das áreas ardidas

O inventário dos incêndios florestais de 2003 [DGRF, 2006] reúne informações relativas a cada uma das ocorrências detectadas pelas entidades e meios responsáveis, nomeadamente os Centros de Coordenação Operacionais (CCO), Corpo Nacional da Guarda Florestal (CNGF) e ainda através do número de emergência para a protecção da floresta contra incêndios (117).

A informação que consta no inventário foi disponibilizada pela actual Direcção-Geral dos Recursos Florestais (DGRF), mediante a solicitação justificada dos mesmos. Esta informação encontra-se organizada por ocorrência. Para cada incêndio florestal ou fogacho (incêndios florestais cuja área ardida é inferior a 1 ha) é identificada (i) a localização geográfica do ponto de ignição, em termos de coordenadas e de unidades administrativas (local, freguesia, concelho, distrito); (ii) a localização temporal (data/hora de alerta e data/hora da extinção do incêndio); e (iii) as áreas ardidas, distintamente identificadas como povoamentos ou matos. É também disponibilizada informação adicional relativa à causa da ocorrência e fonte de alerta, sempre que estas tenham sido apuradas, bem como sobre a eventualidade de reacendimentos, quando tal se verifica. Estes e outros parâmetros que constam do inventário encontram-se enumerados na Tabela 5.1, a título de exemplo, para uma ocorrência registada em 3 de Agosto de 2003 no distrito de Castelo Branco.

Tabela 5.1. Parâmetros do inventário nacional de incêndios florestais [DGRF, 2006].

Parâmetro	Tipo de informação	Exemplo
Localização Geográfica	X, Y (Coordenadas militares)	227078, 292594
	Distrito, Concelho, Freguesia, Local	Castelo Branco, Proença-a-Nova, São Pedro do Esteval, Padrão
	NUT	PT12060305
Alerta	Data, Hora	03-08-2003, 16:25
	Fonte	Populares
	Causa	-
Extinção	Data, Hora	07-08-2003, 10:00
Combate	Primeira intervenção	-
	Reacendimentos	-
Área ardida (ha)	Matos (Públicos/Privados)	400
	Povoamentos (Públicos/Privados)	634
	Total Florestal	1034
	Agrícola	350

- Informação não apurada

Os dados relativos à área ardida revelam que esta superou largamente a média registada nas últimas décadas [DGF, 2003], tendo o ano de 2003 sido “baptizado” como a pior época de incêndios florestais registada em Portugal. Os incêndios florestais foram responsáveis pelo consumo de 425 741 ha de área florestal, 9% da área total da floresta portuguesa, dos quais 67% e 33% corresponderam a povoamentos e matos, respectivamente. De salientar, contudo, que o número de ocorrências (cerca de 26 000), ao contrário do que se poderia esperar, se traduziu num número substancialmente inferior, relativamente ao ano de 2002.

A severidade das chamas afectou de um modo desigual as diferentes regiões de Portugal Continental. É notória a incidência de incêndios na região Interior Norte, Centro do País e Algarve, tal como evidencia a Figura 5.3.

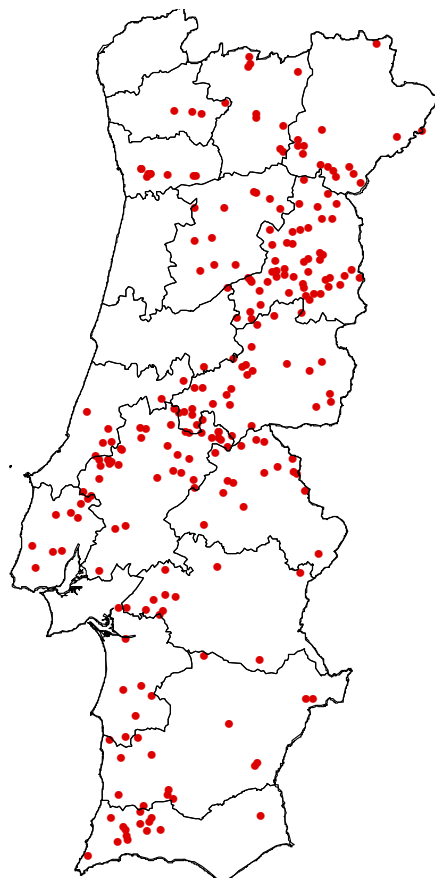


Figura 5.3. Distribuição espacial dos incêndios florestais de 2003, com área superior a 100 ha [DGRF, 2006].

De entre os incêndios florestais, há a destacar os grandes incêndios florestais (com área ardida igual ou superior a 100 ha) que, num total de 247 ocorrências, foram responsáveis pelo consumo de 92% do total de área ardida, 69% em povoamentos florestais. Para além disso, a sua representatividade torna-se particularmente importante neste trabalho por a sua dimensão ser da mesma ordem de grandeza do espaçamento da grelha usada na simulação numérica.

Estes grandes incêndios florestais de 2003 ocorreram durante os meses de Verão, mais propriamente entre Junho e Setembro. Na Figura 5.4 apresenta-se a sua distribuição mensal por área ardida e por número de ocorrências.

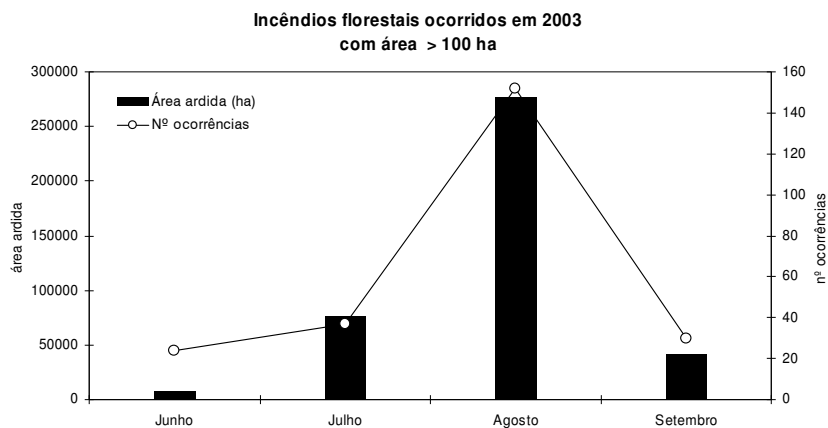


Figura 5.4. Distribuição mensal da área ardida e do número de incêndios florestais ocorridos em 2003, com área superior a 100 ha.

O mês de Agosto evidenciou-se como o mês em que os valores de área ardida e de número de ocorrências foram os mais elevados. Estes dois parâmetros não estão, no entanto, directamente relacionados, como se verifica ao comparar os meses de Junho e Setembro onde, apesar do número de ocorrências ser semelhante, a área ardida é uma ordem de grandeza diferente. A relação entre ambos depende das condições de combustão, nomeadamente do grau de secura do solo e da vegetação.

Uma análise em maior pormenor das ocorrências verificadas no mês de Agosto (Figura 5.5) permite observar que a vasta área ardida foi consumada durante a primeira quinzena deste mês, e mais especificamente durante os primeiros 10 dias.

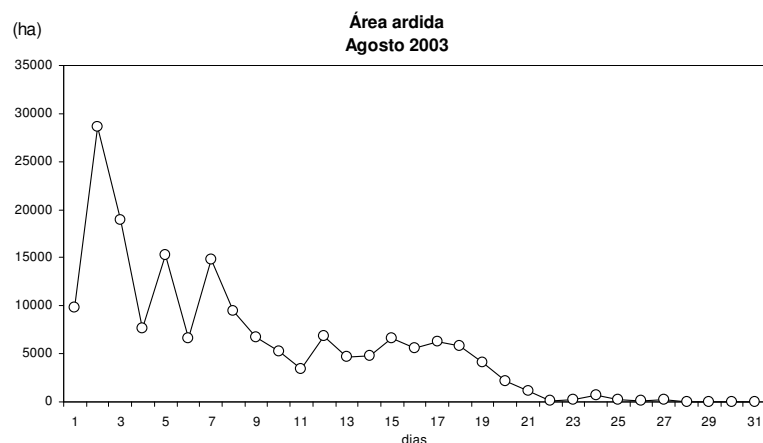


Figura 5.5. Evolução da área ardida durante o mês de Agosto de 2003.

No sentido de averiguar quais as regiões do país mais afectadas pelos incêndios florestais ocorridos no Verão de 2003, apresentam-se na Figura 5.6 a distribuição espacial das ocorrências registadas em 2003, em termos de área ardida e de duração da ocorrência.

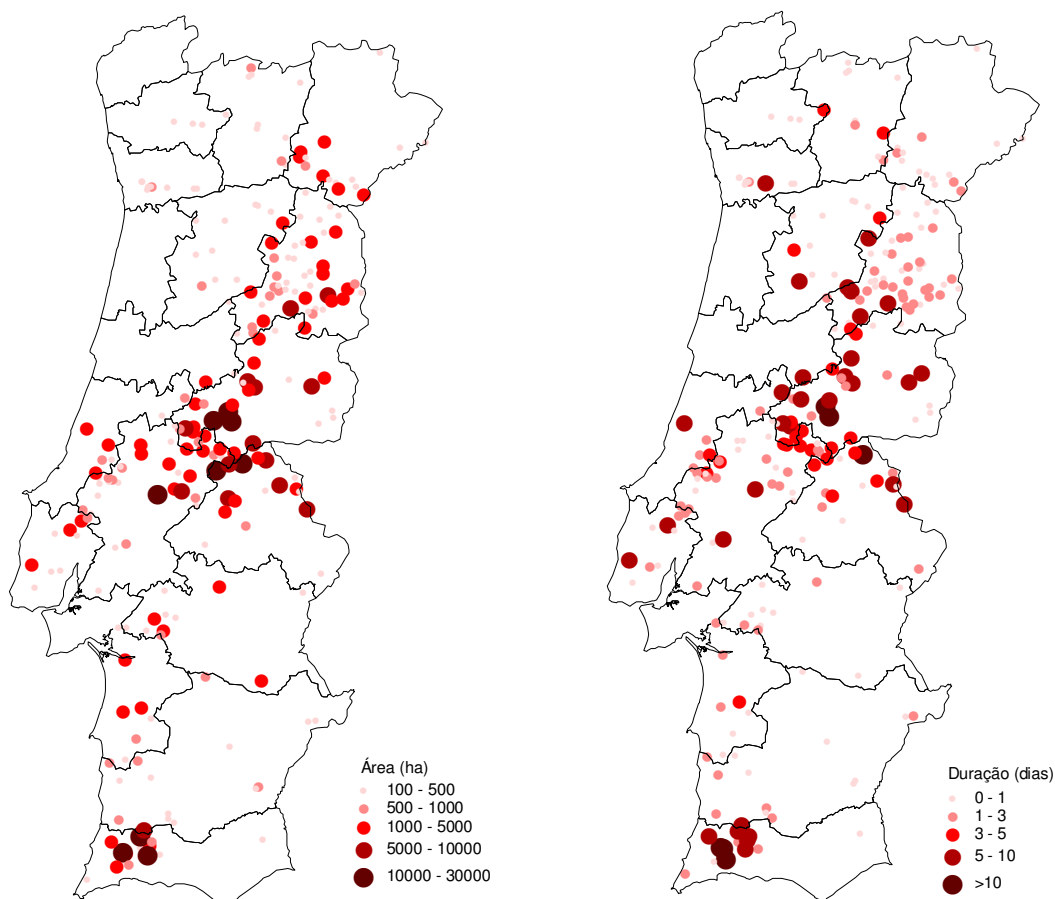


Figura 5.6. Distribuição espacial da área ardida e duração dos incêndios florestais, ocorridos em 2003, com área superior a 100 ha.

É possível destacar três zonas mais afectadas, quer em termos de área, quer de duração do incêndio florestal: a região da Beira Baixa, do Ribatejo (Castelo Branco e Santarém) e o Algarve (Serra de Monchique). Nestas três regiões identificadas, registaram-se ocorrências de fogos em que a área ardida excedeu os 20 000 ha e a sua duração foi superior a 5 dias.

No entanto, se o critério de análise se basear apenas no número de ocorrências, verifica-se que foi o distrito da Guarda aquele que registou o valor mais elevado.

### 5.2.2 Tipos de vegetação (carga combustível) e eficiência de combustão

Para além da área ardida, a metodologia de cálculo de emissões de incêndios florestais necessita de informação relativa ao tipo de vegetação e carga combustível.

O facto destes parâmetros encontrados na bibliografia [Miranda *et al.*, 2005a] se encontrarem expressos em matos e por tipo de povoamento florestal (nomeadamente resinosas, caducas e não caducas), ao contrário dos dados de áreas ardidas discriminados unicamente em matos e povoamentos, criou algumas dificuldades de aplicação relativamente a esta última classe.

Como tal, houve a necessidade de distribuir os diferentes tipos de povoamentos em função da discriminação apresentada na bibliografia, de modo a promover uma relativa adequabilidade dos factores em causa. Assumiu-se que, em 2003, a distribuição de povoamentos afectados pelos incêndios correspondeu à distribuição dos povoamentos no território continental. Para tal, recorreu-se à caracterização mais detalhada e actualizada da floresta portuguesa, através do Inventário Florestal Nacional, cuja última edição é de 2001 [DGF, 2001]. Os dados aí publicados são apresentados na Tabela 5.2 e encontram-se organizados por tipo de povoamento.

Tabela 5.2. Distribuição da área de povoamentos florestais, por espécie dominante [DGF, 2001].

Espécie florestal	Tipo florestal	Área (ha)	Área (%)	Área total (%)
Pinheiro Bravo <i>Pinus pinaster</i>	Resinosas	976 069	30,5	<b>33,8</b>
Pinheiro Manso <i>Pinus pinea</i>		77 650	2,4	
Outras resinosas		27 358	0,9	
Carvalho <i>Quercus spp.</i>	Folhosas caducas	130 899	4,1	<b>5,4</b>
Castanheiro <i>Castanea sativa</i>		40 579	1,3	
Eucalipto <i>Eucalyptus spp.</i>	Folhosas não caducas	672 149	21,0	<b>60,9</b>
Sobreiro <i>Quercus suber</i>		712 813	22,3	
Azinheira <i>Quercus rotundifolia</i>		461 577	14,4	
Outras Folhosas		102 037	3,2	

No caso das folhosas não caducas, não foi possível encontrar factores de emissão de referência, tendo sido aplicados os valores relativos ao eucalipto, espécie mais semelhante em termos de carga de combustível e factores de emissão.

De acordo com estes dados, a área de povoamentos afectada pelos incêndios florestais seguiu a distribuição percentual de cada tipo florestal: 33,8%, 5,4% e 60,9%, para resinosas, folhosas caducas e folhosas não caducas, respectivamente.

O tipo de vegetação ou combustível que alimenta o incêndio florestal constitui um factor primordial para o cálculo das emissões. Este varia com a localização geográfica, o relevo, a carga de combustível e a época do ano. Perante a dificuldade em contabilizar a influência de cada um destes factores, optou-se por caracterizar o tipo de combustível em função da respectiva carga, dado que esta representa a quantidade de combustível disponível por unidade de área.

Após uma revisão bibliográfica em publicações nesta área científica [Viegas, 1989; Trabaud *et al.*, 1993; PNAC, 2002; EEA, 2006], foram seleccionados os valores de carga combustível, relativos à floresta portuguesa, apresentados no Programa Nacional para as Alterações Climáticas (PNAC) de 2002 [PNAC, 2002]. Estes valores são apresentados na Tabela 5.3 para os tipos de combustível mais representativos, nomeadamente: matos, resinosas, caducas e eucalipto. No presente trabalho foram usados os valores médios da gama apresentada para cada tipo de combustível.

Tabela 5.3. Valores de carga de combustível e eficiência de combustão para diferentes tipos de combustível [PNAC, 2002; EEA, 2006].

Tipo de combustível	Carga Combustível (kg m <sup>-2</sup> )	Eficiência da combustão
Matos	0,9 – 1,1	0,80
Resinosas	7,9 – 9,3	0,25
Caducas	1,2 – 2,3	
Eucalipto	3,9	

Relativamente à eficiência de combustão, esta pode ser entendida como a fracção de biomassa consumida face à total disponível, sendo um parâmetro determinante na estimativa das emissões de fogos florestais. Apesar da diversidade de valores de eficiência, relativos a matos e povoamentos, existente na bibliografia [Seiler e Crutzen, 1980; Levine *et al.*, 1989; Simpson *et al.*, 1999; Battye e Battye, 2002; PNAC, 2002; EEA, 2006], optou-se por utilizar os indicados pelo PNAC e pela EEA (ver Tabela 5.3).

De salientar que o valor relativamente elevado de eficiência de combustão dos matos deve-se à baixa humidade dos mesmos e à sua estrutura física. Para os povoamentos florestais, a reduzida eficiência de queima está estreitamente relacionada com a heterogeneidade da distribuição de combustível disponível, característica das áreas florestais portuguesas.

### 5.2.3 Factores de emissão

Na determinação das emissões é frequente a distinção de duas fases de combustão: a fase de chama (“flaming”) e a de incandescência (“smoldering”). Durante a fase de chama, os compostos mais emitidos são o  $\text{CO}_2$  e o vapor de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ) e, em menor quantidade,  $\text{NO}_x$  e matéria particulada (PM) com elevado conteúdo em carbono. Nesta fase, predominam as emissões mais oxidadas, como resultado de uma maior eficiência de combustão, verificando-se um consumo de 20-90% do combustível disponível [Miranda, 1998]. Na fase de incandescência (sem chama) predominam as emissões reduzidas ou parcialmente oxidadas, sobretudo  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ , COVNM e hidrocarbonetos poliaromáticos (PAH), amónia ( $\text{NH}_3$ ), compostos de enxofre e partículas com baixo conteúdo em carbono elementar.

Devido à variabilidade das emissões durante a combustão, existem factores de emissão para cada uma das fases referidas. Face à diversidade de factores de emissão disponíveis na literatura e pelo facto de se pretender representatividade, optou-se por um conjunto de factores de emissão relativos à floresta do Sul da Europa [Miranda, 2004]. Devido à ausência de informação detalhada sobre o tipo e evolução do fogo, não foi possível aplicar factores de emissão detalhados, tendo sido utilizados os factores referentes ao fogo na sua globalidade.

A Tabela 5.4 apresenta os factores de emissão médios considerados para os principais poluentes emitidos. É notória a variabilidade registada para cada poluente em função do tipo de combustível. No entanto, é particularmente evidente a proximidade de valores entre os tipos caducas e eucalipto.

Tabela 5.4. Factores de emissão médios para a floresta do Sul da Europa [Miranda, 2004].

Poluente	Factores de Emissão ( $\text{g kg}^{-1}$ )			
	Matos	Resinosas	Caducas	Eucalipto
$\text{CO}_2$	1477	1627	1393	1414
$\text{CO}$	82	75	128	117
$\text{CH}_4$	4	6	6	6
COVNM	9	5	6	7
$\text{PM}_{2.5}$	9	10	11	11
$\text{PM}_{10}$	10	10	13	13
$\text{NO}_x$	7	4	3	4

### 5.2.4 Cálculo de emissões

A aplicação da metodologia descrita permite a estimativa dos valores de emissão de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ , COVNM,  $\text{PM}_{2.5}$ ,  $\text{PM}_{10}$  e  $\text{NO}_x$  provenientes dos fogos florestais, expressos, quer em termos do total por ocorrência (kg poluente), quer por tempo (kg poluente/dia, kg poluente/hora). A representação esquemática da Figura 5.7 pretende ilustrar e resumir os dados iniciais, o processamento da informação e os resultados obtidos com esta metodologia. Em termos do grau de precisão associado

a este tipo de inventários, estima-se que as várias aproximações consideradas possam conduzir a incertezas até um factor 2 [French *et al.*, 2004; Hodzic *et al.*, 2007].

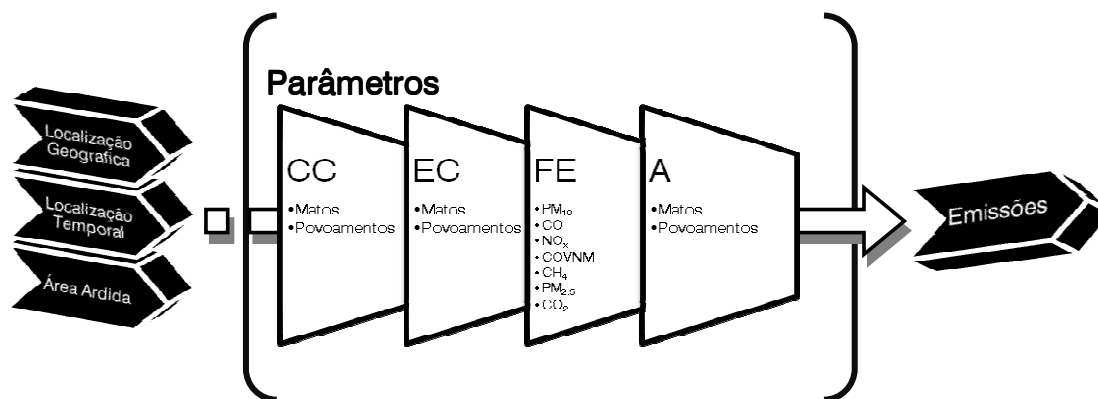


Figura 5.7. Esquema da metodologia de cálculo das emissões dos incêndios florestais.

Na Tabela 5.5 apresentam-se, a título de exemplo, os resultados, para cada um dos poluentes, relativos à ocorrência registada no dia 3 de Agosto de 2003 e descrita na Tabela 5.1.

Tabela 5.5. Valores estimados de emissões relativos a uma ocorrência de incêndio florestal registada em 3 de Agosto de 2003.

Parâmetro	Tipo de informação		Dados
Localização geográfica	X, Y (coordenadas militares)		227078, 292594
Duração da ocorrência	Alerta	03-08-2003, 16:25	3,73 dias
	Extinção	07-08-2003, 10:00	89,58 horas
Área ardida (ha)	Matos		400
	Povoamentos		634
Emissão			
Poluente	(kg)	(kg dia <sup>-1</sup> )	(kg hora <sup>-1</sup> )
CO <sub>2</sub>	65 023 237	28 076 000	1 169 833
CO	2 638 638	1 139 322	47 472
CH <sub>4</sub>	153 105	66 108	2 755
COVNM	160 020	69 094	2 879
PM <sub>2,5</sub>	158 400	68 395	2 850
PM <sub>10</sub>	305 874	132 072	5 503
NO <sub>x</sub>	100 703	43 482	1 812

A aplicação da metodologia a cada uma das 247 ocorrências permitiu o cálculo das emissões totais dos incêndios florestais de 2003 em Portugal. Na Tabela 5.6 é apresentada a comparação entre este valor e o total das restantes emissões provenientes da actividade humana [IA, 2005b].



Tabela 5.6. Comparação entre as emissões totais dos incêndios florestais de 2003 em Portugal e as restantes emissões antropogénicas.

Tipo de emissões	Emissões estimadas para 2003 (t)						
	CO <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	COVM	PM <sub>2,5</sub>	PM <sub>10</sub>	NO <sub>x</sub>
Incêndios florestais	22 167 772	456 858	25 773	31 616	25 773	53 440	21 194
Transportes	19 472 820	315 265	35 660	62 847	9 849	9 877	130 109
Indústria e serviços	30 919 120	357 701	2 760	120 887	80 372	106 365	140 371
<b>Incêndios/Total emissões (%)</b>	<b>30,6</b>	<b>40,4</b>	<b>40,2</b>	<b>14,7</b>	<b>22,2</b>	<b>31,5</b>	<b>7,2</b>

Verifica-se que as emissões provenientes dos incêndios florestais ocorridos em 2003 constituem, em termos absolutos anuais, uma percentagem significativa em relação a quase todos os poluentes, nomeadamente no que diz respeito ao CO (40%), CH<sub>4</sub> (40%), CO<sub>2</sub> (30%) e PM<sub>10</sub> (32%). A comparação das emissões horárias dos incêndios florestais revela, por sua vez, valores duas ordens de grandeza superiores ao total horário emitido pelas restantes fontes emissoras.

Na Figura 5.8 apresenta-se o mapa das emissões estimadas de PM<sub>10</sub> e CO libertadas nos incêndios florestais ocorridos no Verão de 2003. Tal como seria de esperar, estes mapas revelam padrões semelhantes à distribuição da área ardida e da duração do fogo florestal (Figura 5.6).

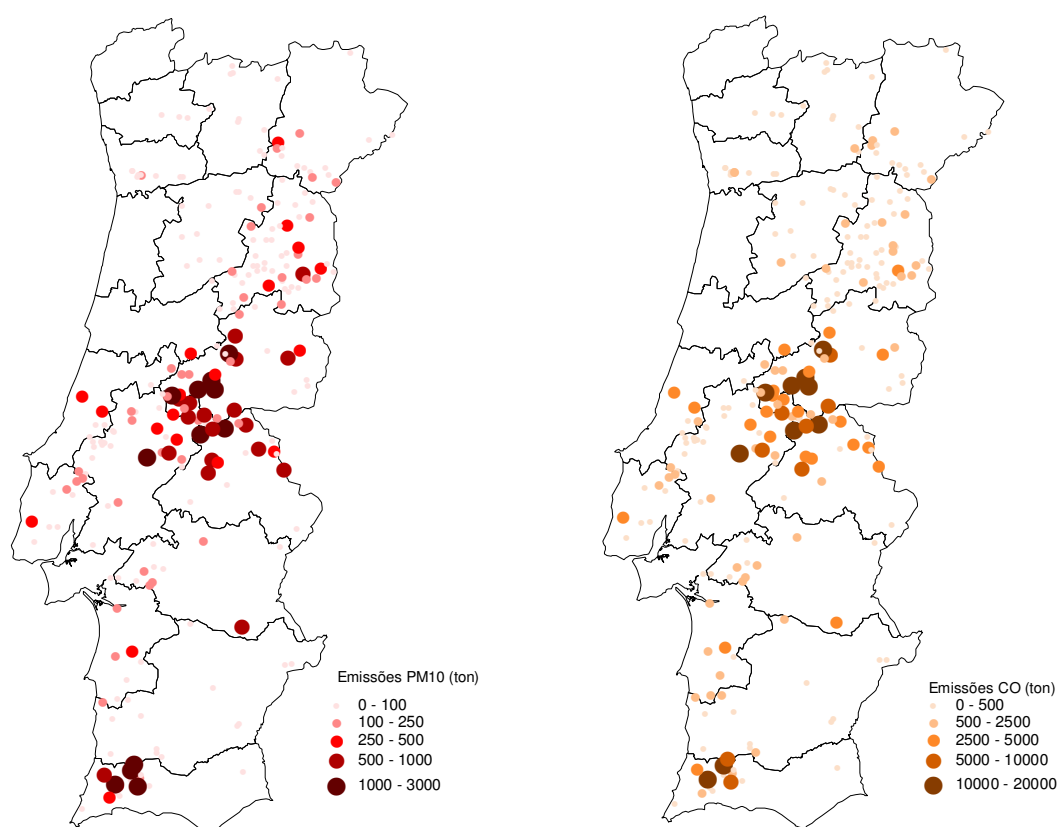


Figura 5.8. Distribuição espacial das emissões estimadas de PM<sub>10</sub> e CO dos incêndios florestais, com área superior a 100 ha, ocorridos em 2003.

No sentido de integrar as emissões provenientes dos incêndios florestais no sistema de modelação da qualidade do ar, foi desenvolvido um módulo (processador numérico) que permite adicionar estas emissões às restantes emissões (antropogénicas e biogénicas) na respectiva célula da malha de simulação.

Este módulo de cálculo de emissões consiste num programa em linguagem "Fortran90" e foi desenvolvido de acordo com as especificidades do modelo químico CHIMERE. A informação necessária e requerida por este processador/módulo compreende a:

- localização geográfica da ocorrência do fogo (lat/long ou célula do modelo);
- data/hora Alerta;
- data/hora da Extinção;
- duração da ocorrência (h);
- emissões por ocorrência ( $\text{kg h}^{-1}\text{km}^{-2}$ ).

Este módulo de emissões está preparado para ser aplicado para outros anos (ou períodos de tempo), bastando para tal dispor do mesmo tipo de informação relativa à localização, duração e emissões resultantes do incêndio florestal. A sua aplicação permite obter uma nova grelha de emissões que contabiliza a contribuição extraordinária dos incêndios florestais que tenham ocorrido numa determinada célula da malha de simulação. Esta matriz de emissões constitui informação de entrada para o modelo de qualidade do ar, possibilitando simular o estado da atmosfera mais correctamente.

A estimativa da altura de sobrelevação da pluma de fumo, essencial para uma correcta integração das emissões dos fogos na simulação dos processos de transporte e deposição, foi feita com base em pesquisa bibliográfica. Apesar de alturas baixas de injeção poderem ser aplicadas em vários episódios de queima de biomassa [Miranda, 1998], foi já comprovado que nos grandes incêndios florestais, como os que ocorreram em Portugal no Verão de 2003, as emissões devem ser "introduzidas" na troposfera livre [Damoah *et al.*, 2004]. Estudos prévios estimaram a altura de sobrelevação de alguns fogos que ocorreram em Portugal acima dos 1 000 metros [Hodzic *et al.*, 2006]. No presente estudo, as emissões foram adicionadas e distribuídas no domínio vertical de simulação entre os 100 e os 3 000 metros.

Relativamente à simulação da progressão do fogo, admitiu-se que a emissão de poluentes associada a uma determinada ocorrência evolui, em termos de dispersão, uniformemente em todas direcções da célula associada ao ponto de ignição. Esta é uma aproximação necessária, apesar de constituir uma limitação, uma vez que não foi considerada a evolução do incêndio em termos de progressão horizontal.

### 5.3 Avaliação dos resultados da modelação - ano 2003

O sistema de modelação MM5-CHIMERE foi novamente aplicado, agora ao caso específico do Verão de 2003. Para esta aplicação específica, que visa avaliar o impacto das emissões dos incêndios florestais na qualidade do ar resultante, foram idealizadas duas simulações:

- simulação de referência (SR): onde não foram consideradas as emissões provenientes dos incêndios florestais.
- simulação com fogos (SF): integrando a contribuição dos incêndios florestais através do módulo de emissões anteriormente descrito.

O impacto da inclusão das emissões dos incêndios florestais foi avaliado, primeiro através da validação do modelo por comparação com dados monitorizados e, numa segunda fase, pela interpretação gráfica das diferenças encontradas nas duas simulações.

Os dados observados, que serviram de base para o exercício de validação, foram recolhidos nas estações de monitorização com funcionamento eficiente durante 2003 (Tabela 2.1 e 2.2), num total de 32 estações de  $O_3$  e 29 de  $PM_{10}$ . Apesar do número relativamente elevado, 90% destas estações estão confinadas às áreas metropolitanas de Lisboa e Porto, dificultando a avaliação do impacto das emissões dos fogos florestais no resto do país, onde se verificaram a maioria das ocorrências (Figura 5.6).

Na Tabela 5.7 são apresentados os resultados da comparação estatística entre os valores de concentração horários observados e modelados (calculando a média das estações de monitorização existentes em cada distrito), para cada uma das simulações (SR e SF), e para os dois poluentes em estudo ( $PM_{10}$  e  $O_3$ ). De uma forma geral, o desempenho do sistema de modelos é muito satisfatório, apresentando factores de correlação ( $r$ ) superiores a 0,7 para as partículas e ozono e desvios médios (EQM) de 20-40  $\mu g m^{-3}$ . É de realçar o bom desempenho em relação às partículas, comparativamente com os valores encontrados em bibliografia para este poluente [Bessagnet *et al.*, 2004; van Loon, 2004]. As correlações são superiores às encontradas para a aplicação de 2001 (Secção 4.1.2.2), o que se justifica pela actualização e melhoria do inventário de emissões usado. De um modo geral, há uma subestimativa ( $BIAS > 0$ ) das concentrações de ambos os poluentes, com excepção da região do Porto onde se verifica a situação contrária.

Apesar deste bom comportamento do modelo, verifica-se um melhor desempenho quando são consideradas as emissões dos incêndios florestais (SF), principalmente em termos de redução dos erros (EQM e BIAS) entre os dados observados e simulados. A maior diferença entre as duas simulações, que se traduz num maior impacto dos fogos na qualidade do ar, é registado nos distritos de Santarém, Porto, Lisboa e Coimbra, para ambos os poluentes.

Tabela 5.7. Análise estatística do desempenho do modelo na simulação referência (SR) e na simulação com emissões de incêndios florestais (SF), por distrito, para  $PM_{10}$  e  $O_3$ .

Distrito	$O_3$						$PM_{10}$					
	EQM ( $\mu g m^{-3}$ )		BIAS ( $\mu g m^{-3}$ )		r		EQM ( $\mu g m^{-3}$ )		BIAS ( $\mu g m^{-3}$ )		r	
	SR	SF	SR	SF	SR	SF	SR	SF	SR	SF	SR	SF
Aveiro	40,5	40,3	-23,3	-26,1	0,75	0,75	35,8	33,6	28,1	26,7	0,67	0,73
Coimbra	28,4	25,2	13,8	9,5	0,85	0,88	52,1	48,7	43,0	39,4	0,75	0,77
Faro	14,7	14,9	5,8	5,5	0,94	0,92	30,2	27,2	27,3	24,2	0,83	0,86
Lisboa	40,9	29,4	28,4	-0,4	0,77	0,77	17,4	15,8	5,6	5,2	0,77	0,82
Porto	37,8	34,0	-5,5	3,7	0,65	0,64	43,8	34,2	-11,2	-6,4	0,73	0,75
Santarém	68,3	61,8	56,6	49,6	0,86	0,83	41,3	40,0	28,6	26,6	0,74	0,87
Setúbal	24,1	27,9	-2,1	4,6	0,77	0,73	22,7	21,0	-3,1	-2,4	0,67	0,71
<b>Média</b>	<b>36,4</b>	<b>33,3</b>	<b>10,6</b>	<b>6,6</b>	<b>0,80</b>	<b>0,79</b>	<b>34,8</b>	<b>31,5</b>	<b>15,0</b>	<b>14,9</b>	<b>0,74</b>	<b>0,79</b>

Uma análise estatística mais detalhada, por estação, é apresentada na Figura 5.9 e 5.10, para o  $O_3$  e para as  $PM_{10}$ , respectivamente.

Relativamente ao  $O_3$ , este estudo permite concluir que existem estações onde a melhoria do desempenho do modelo com a incorporação das emissões dos incêndios é particularmente notória (Entrecampos, Restelo, Chamusca), nomeadamente no que diz respeito aos erros absolutos e sistemáticos. Esta melhoria não é, porém, verificada em todos os locais, nomeadamente no que diz respeito ao factor de correlação e ao poluente  $O_3$ . Estudos no Norte e Centro da Europa [Hodzic *et al.*, 2007] apontam para que as emissões libertadas por grandes incêndios florestais sejam responsáveis por um decréscimo de 15-30% nas taxas de fotólise. Dado que esta perturbação nas taxas de fotólise não é considerada na simulação numérica, será de esperar que a melhoria do desempenho do modelo seja menos significativa, ou menos evidente, para poluentes fotoquímicos como o ozono.

Relativamente às  $PM_{10}$  (Figura 5.10), verifica-se uma uniformidade (em todas as estações) na diminuição dos erros quando são incorporadas as emissões dos incêndios. Isto é explicado por se tratar de um poluente primário emitido directamente pela queima de biomassa florestal. Há, para além disso, a salientar o facto de se confirmar uma sobrestimativa das emissões antropogénicas de  $PM_{10}$  na região do Porto: o erro sistemático médio BIAS é negativo em todas as estações da aglomeração do Porto Litoral. Os resultados das simulações na estação da Chamusca, área especialmente afectada por incêndios florestais (ver Figura 5.6), revelam a importância das emissões destes na qualidade do ar ambiente. Este resultado sugere que, apesar das diferenças encontradas entre as duas simulações nas várias estações existentes, estas deveriam ser ainda mais pronunciadas caso as medições fossem realizadas mais próximo dos focos de incêndio.

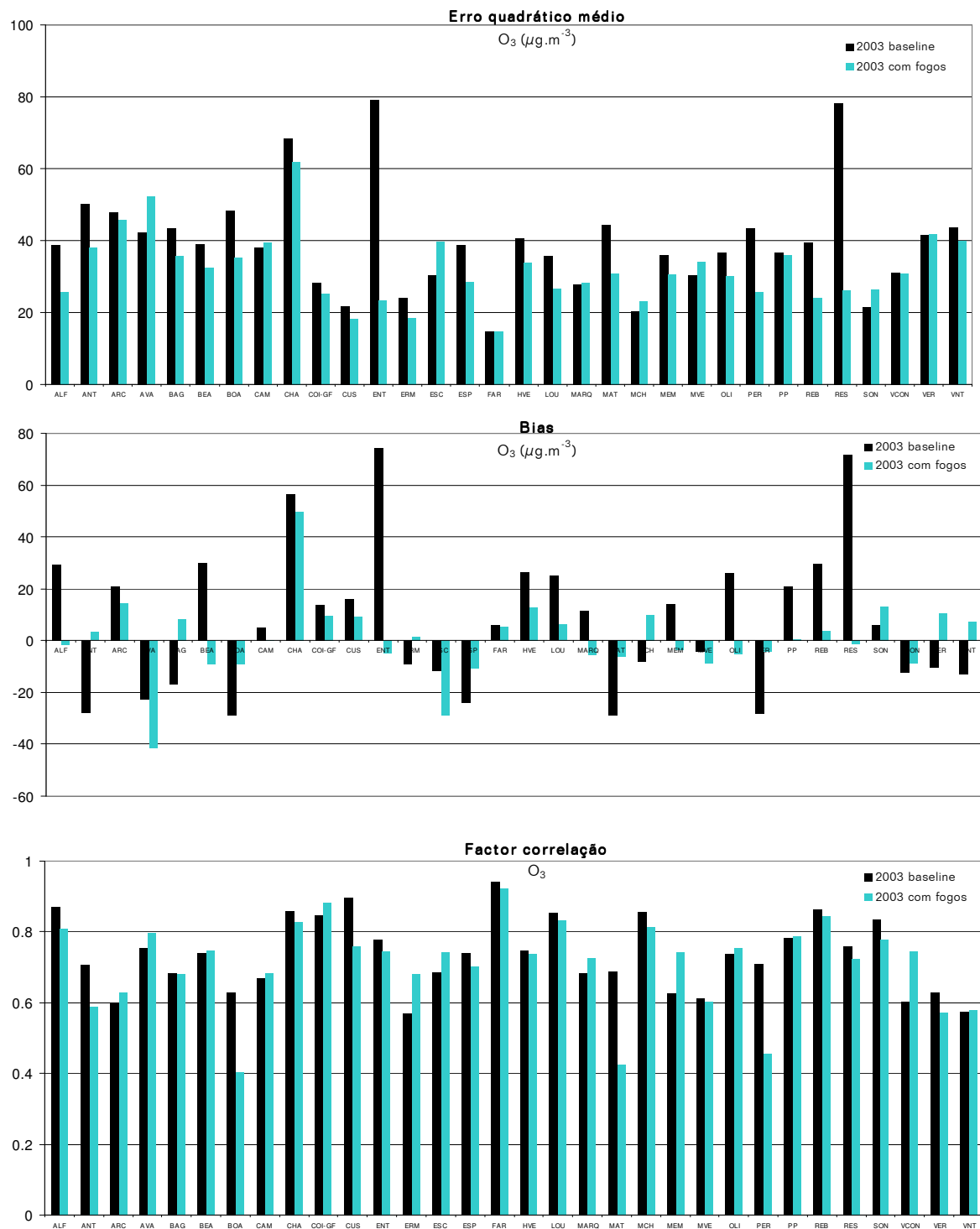


Figura 5.9. Parâmetros estatísticos (erro quadrático médio, BIAS e factor de correlação) obtidos na validação do sistema de modelos, para cada estação de monitorização de O<sub>3</sub>.

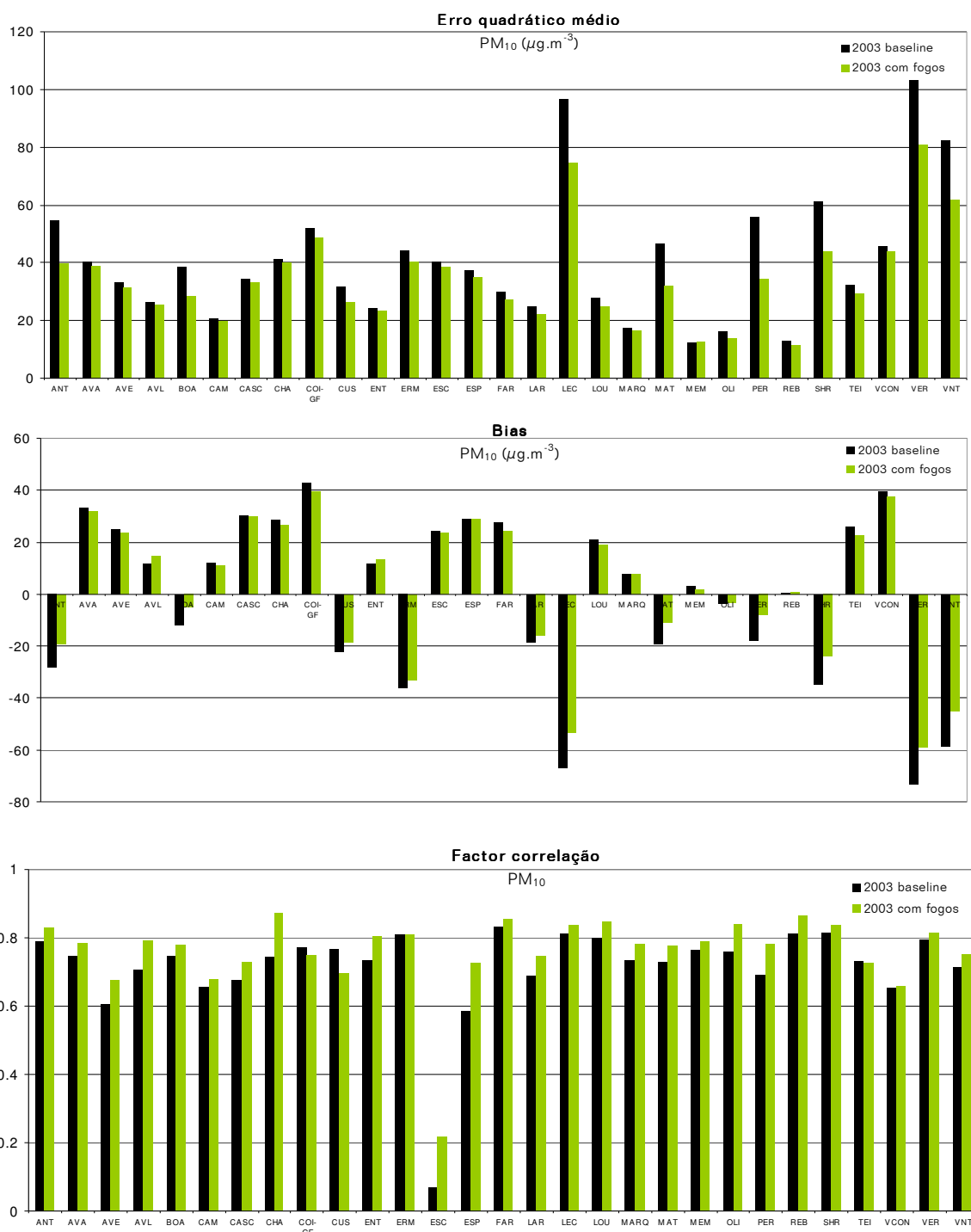


Figura 5.10. Parâmetros estatísticos (erro quadrático médio, BIAS e factor de correlação) obtidos na validação do sistema de modelos, para cada estação de monitorização de PM<sub>10</sub>.

Para avaliar o impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar, analisou-se ainda o número de ultrapassagens ao valor limite legislado observadas e simuladas, incluindo e excluindo as emissões dos incêndios. A Figura 5.11 apresenta esta comparação, relativa ao mês de Agosto de 2003, para todas as estações de fundo de O<sub>3</sub> e PM<sub>10</sub>.

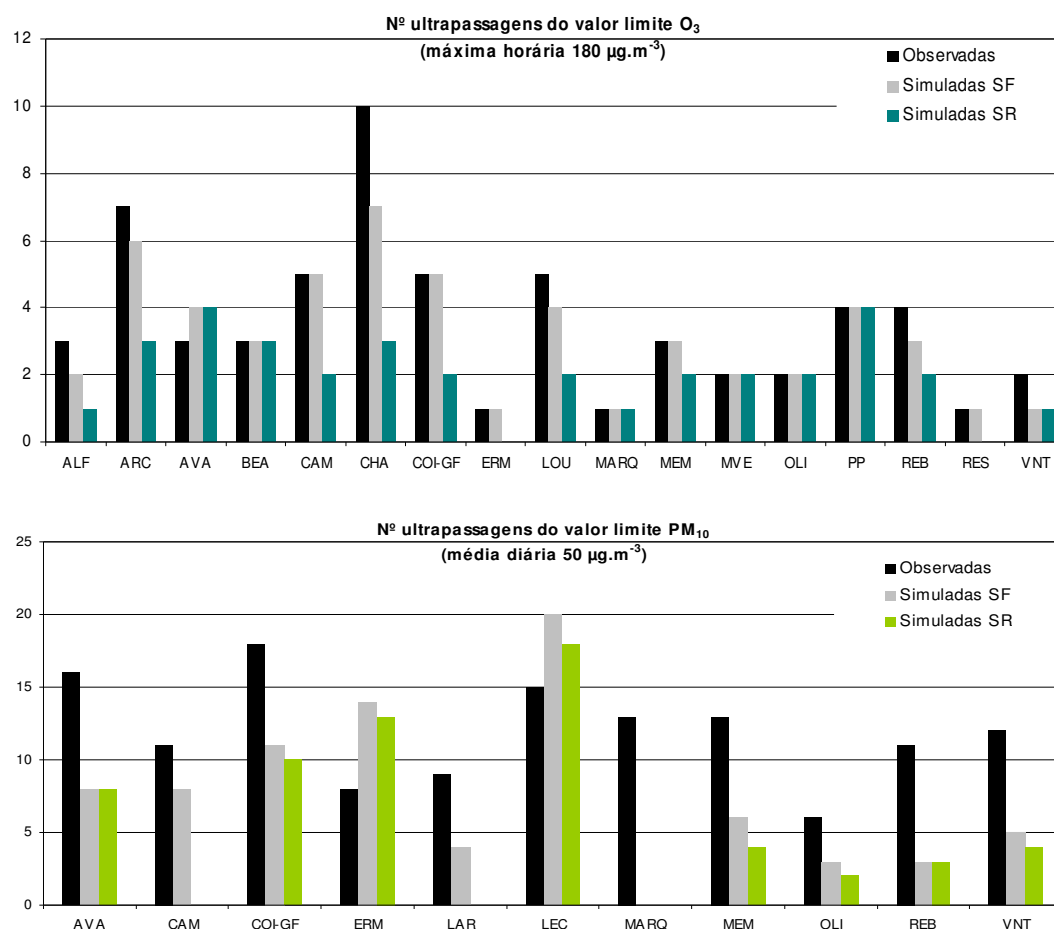


Figura 5.11. Comparação entre o número de ultrapassagens, ao valor limite legislado, observado e simulado (SR e SF), durante Agosto 2003, em cada estação de fundo de O<sub>3</sub> e PM<sub>10</sub>.

A análise da simulação de referência revela que o sistema de modelação subestimou as excedências registadas para ambos os poluentes, com excepção das observadas no Porto (Ermeside e Leça), justificadas pela já referida sobrestimativa das emissões de PM<sub>10</sub> nesta área.

Comparando as duas simulações numéricas, verifica-se que o número de excedências (de O<sub>3</sub> e PM<sub>10</sub>) aumenta com a inclusão das emissões provenientes dos incêndios florestais. Este facto é mais notório e flagrante para determinadas estações, localizadas na região centro do país (Coimbra, Chamusca e Loures) e na região de Setúbal (Arcos, Camarinha e Laranjeiro), onde o número de excedências aumenta mais de 30%.

A título de exemplo são apresentadas nas Figura 5.12 e 5.13 as diferenças espaciais calculadas entre a simulação com fogos (SF) e a de referência (SR), para a máxima diária de O<sub>3</sub> e a média diária de PM<sub>10</sub>, respectivamente, de 1 a 8 de Agosto de 2003, período com maior número de ocorrência de incêndios e área florestal ardida (Figura 5.5).

Apesar de se registarem efeitos dos incêndios florestais na qualidade do ar durante toda a semana, é notório o impacto nos dias 2, 3 e 5 de Agosto em vastas áreas do país, provocando diferenças de concentrações máximas diárias de ozono superiores a  $200 \mu\text{g m}^{-3}$  e médias diárias de  $\text{PM}_{10}$  superiores a  $300 \mu\text{g m}^{-3}$ . Estes foram também os dias mais críticos em termos de área ardida e número de ocorrências de incêndios florestais (Figura 5.5).

A comparação entre a Figura 5.12 e Figura 5.13 evidencia a natureza diferente dos dois poluentes: as concentrações de  $\text{PM}_{10}$  mais elevadas ocorrem próximo dos focos de incêndio, enquanto que a pluma de ozono surge, na maioria dos dias, bastante afastada (distâncias superiores a 100 km) dos locais de ocorrência (assinalados a preto).

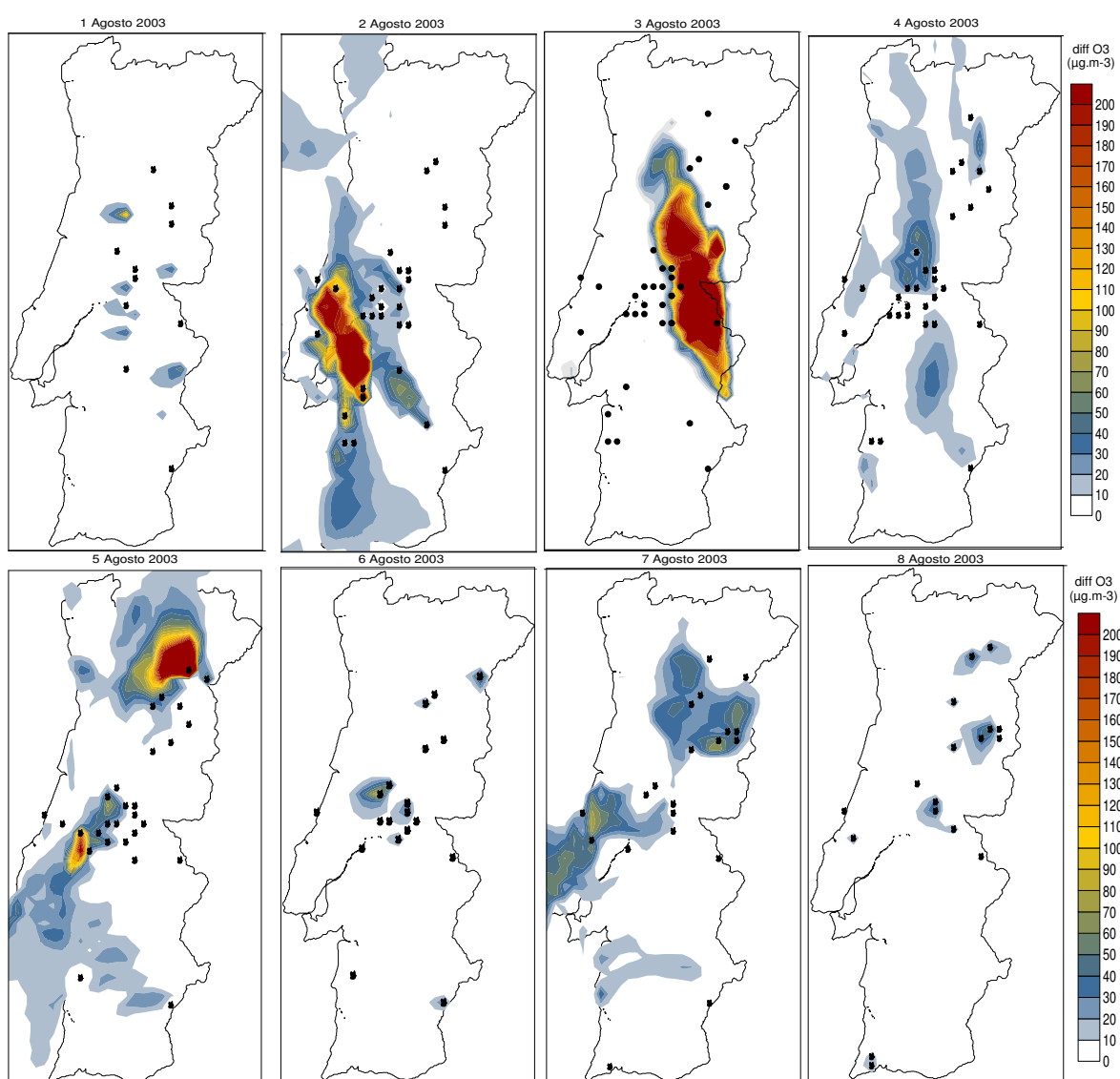


Figura 5.12. Diferenças obtidas ( $\mu\text{g m}^{-3}$ ) entre a simulação com emissões de incêndios florestais e a simulação de referência, para a máxima diária de  $\text{O}_3$ , para os dias 1 a 8 de Agosto de 2003.



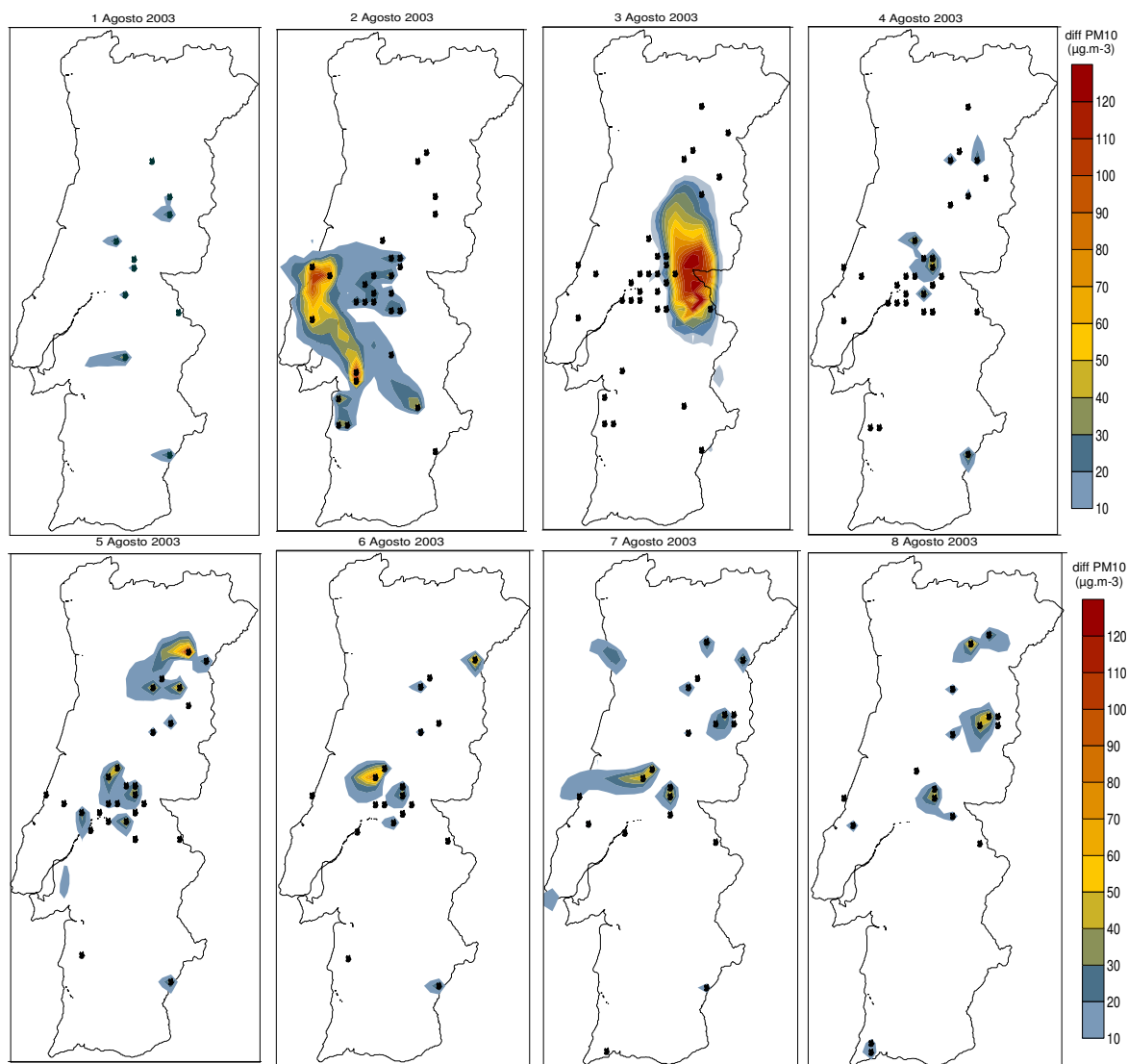


Figura 5.13. Diferenças obtidas ( $\mu\text{g m}^{-3}$ ) entre a simulação com emissões de incêndios florestais e a simulação de referência, para a média diária de  $\text{PM}_{10}$ , para os dias 1 a 8 Agosto de 2003.

É de salientar que se avaliou apenas o impacto dos fogos à superfície (abaixo dos 50 metros), existindo, no entanto, impactos também consideráveis acima deste nível, dada a sobrelevação da pluma de fumo.

Para além dos efeitos verificados ao nível nacional, os impactos destes incêndios florestais foram sentidos a uma maior escala. Alguns autores identificaram esta fonte de emissões como a responsável pela modificação das propriedades ópticas dos aerossóis na bacia mediterrânica [Pace *et al.*, 2005] e no Norte da Europa [Hodzic *et al.*, 2006].

## Chapter VI.

### Air quality forecast for Portugal

Air quality forecasting is a challenging scientific problem, which has recently undergone considerable pressure in many urbanised and industrialised countries due to the increasing consciousness of the effect on health and environment of pollutants emissions into the atmosphere. Statistical models are a common tool used for this purpose, based on the relationship between a set of meteorological predictors and the values of the concentrations at different monitoring stations, and using a variety of mathematical models such as linear or nonlinear regressions, classification and regression tree or artificial neural networks [Gardner and Dorling, 2000]. However, the lack of diagnosis capabilities of the source of pollution and the requirement of large enough training data sets for tuning model's coefficients (a limiting constraint for Portugal) limit statistical forecasting. In contrast, models based on physical equations ("numerical models") can drive the chemistry and the transport of pollutants but require large computer time and numerous accurate input data (emissions, meteorology, etc.) [USEPA, 1999]. However, these latter problems have become less significant with time, due to both increases in computer capabilities and to improvements in the databases required for the deterministic approach of forecasting.

Statistical models were developed for Lisbon and Porto, the unique areas where a sufficient wide and historic dataset of meteorological and air quality data is available to build up a linear regression based on these two variables. Both forecast statistical models were developed taking into account two years of complete data and validated against two other available years. Relative humidity, maximum daily temperature and wind speed were found to be the meteorological variables with higher correlation with air quality data ( $O_3$  and  $PM_{10}$ ). However, the correlation coefficients increase considerably when the concentration of the day before is added to the regression equation, reaching factors higher than 0.75 and bias below  $3 \mu g m^{-3}$  for both cities.

For air quality operational forecast over mainland Portugal, the MM5-CHIMERE numerical modelling system was adopted [Monteiro *et al.*, 2005b]. The model version implemented for operational

purpose is similar to the one described before, with some simplifications in order to reach a sufficiently quick simulation to fulfill the real-time forecasting constraint. The forecasting system is designed to deliver values in the early morning (D+0) for the same and the next 2 days. Meteorological forecasts are obtained at day D+0 using the MM5 mesoscale meteorological model forced by the AVN/NCEP global forecasts. Processed meteorological variables are then provided to the chemistry-transport model, as well as the emissions. The photochemical model is initialised at 00 UT on D-1, using the previous 24 hours forecast, without any use of observations. In the same way as the air quality assessment approach, a first continental-scale run is performed, followed by a nested simulation over the mainland Portugal domain, using the same domains and grid resolution, as defined for the long-term application. Emissions are derived at the European scale from the last update of EMEP database [EMEP, URL7]. Over the Portuguese domain, emissions are obtained through the most recent national inventory, spatially downscaled to municipality level [Monteiro *et al.*, 2007a]. Once all the calculations are achieved, the meteorological and air quality outputs are delivered on a web server and expressed in terms of air quality index maps for easier public information. The forecasting system began real-time application in 2004, regarding gas pollutants, and in 2006 was extended for aerosols. During these two years it has been tested and validated against monitoring data.

The model correctly forecast the main meteorological variables observed at the different synoptic stations, decreasing skill with lead time. It shows a better performance for the temperature forecast (with a correlation higher than 0.9 and RMSE inferior to 2.5°C), even in urban areas, in relation to the wind simulation. Nevertheless, the wind components exhibit a RMSE inferior to 1.8 m s<sup>-1</sup> and an average negative bias of 0.3 m s<sup>-1</sup>. The meridional component presents higher correlation, justified by the north dominant wind direction. There is no overall tendency for MM5 to predict temperature, besides a usual negative bias over coastal sites. Concerning the chemical model evaluation, the comparison between air quality index observed and predicted at background stations shows an agreement of 60% and a success of detecting alarms higher than 50% (but with several false alarms) for both O<sub>3</sub> and PM<sub>10</sub>. The forecast for industrial and traffic stations exhibits higher errors and lesser correlation, indicating that emissions/representativeness errors are probably higher at these sites. At background stations, O<sub>3</sub> forecasts are slightly underestimated on average, with a bias in the range 0-5 µg m<sup>-3</sup>, in contrast to the traffic and industrial stations where the O<sub>3</sub> peaks are overestimated. This underestimation is more evident for specific rural sites located in the interior north and center, likely exposed to emissions from Spain. For PM<sub>10</sub>, there is an overall tendency to overestimate daily averages, with a special focus on the Porto area. Quite surprisingly there is no obvious trend for model performance decreasing with the lead time.

This validated forecast system was launched for public dissemination beginning in 2007 through web page and media. Strategic emission reduction measures are suggested in order to react to bad air quality forecast.

## Capítulo VI

### 6. Previsão da qualidade do ar para Portugal

Neste capítulo é abordada a previsão operacional da qualidade do ar. Para além do estado actual de conhecimentos e aplicação, é apresentado o desenvolvimento e avaliação de um modelo de previsão estatística para Lisboa e Porto, assim como a aplicação do sistema de modelação numérica para Portugal Continental. De acordo com o identificado no Capítulo 2, ambos os métodos de previsão se focalizaram nos poluentes mais críticos no panorama nacional:  $O_3$  e  $PM_{10}$ . É ainda descrita a forma de divulgação da previsão numérica para o público em geral e apresentadas as linhas gerais para uma futura estratégia de gestão da qualidade do ar, tendo em conta a sua previsão.

#### 6.1 Estado-da-arte da previsão da qualidade do ar

A Directiva-Quadro 96/62/CE da EU define como prioridade futura a previsão do estado da qualidade do ar, para além do estabelecimento e cumprimento dos valores limite para a protecção do ambiente e da saúde humana. A previsão deverá ser fornecida, numa base diária, como informação ao público em geral e às autoridades, de modo a suportar decisões estratégicas para a redução de emissões e gestão da qualidade do ar.

O sucesso de um programa ou método de previsão da qualidade do ar depende não só da precisão e exactidão das previsões, mas também do modo como se adequa e cumpre as necessidades e objectivos dos utentes/utilizadores do sistema de previsão [USEPA, 1999]. No caso particular de Portugal, a previsão da qualidade do ar tem como principais objectivos:

- Informar o público em geral e as autoridades para protecção da saúde pública, através da sua divulgação (televisão, rádio, imprensa e/ou internet) em tempo real;
- Suportar decisões estratégicas e programas de controlo/redução de emissões para gestão da qualidade do ar;

- Avaliar (e relocalizar) a rede de monitorização da qualidade do ar, garantindo a cobertura dos locais mais críticos em termos de poluição do ar.

Estes objectivos e propostas serão, no entanto, apenas possíveis de realizar se o método de previsão seleccionado e aplicado for credível e possibilitar previsões com relativa antecipação. São vários os métodos já existentes e aplicados para prever a qualidade do ar. De um modo geral, os métodos de desenvolvimento mais simples e de fácil operação têm uma baixa precisão e exactidão, enquanto que modelos mais complexos produzem previsões mais próximas da realidade. Porém, esta relação nem sempre é linear.

O método ideal deve ser escolhido de acordo com o objectivo de utilização e a precisão desejada. Muitas vezes é aconselhável a combinação de dois ou mais métodos, equilibrando as limitações de um com as vantagens do outro [Delle Monache e Stull, 2003].

Os métodos existentes e usados na previsão da qualidade do ar dividem-se em métodos estatísticos e numéricos [USEPA, 1999]. Os métodos estatísticos baseiam-se nas relações existentes entre variáveis meteorológicas e de qualidade do ar, fornecendo, em alguns casos, uma probabilidade de excedência de um determinado nível de concentração.

Os principais métodos estatísticos existentes em bibliografia e utilizados na prática resumem-se a:

- **método da persistência:** as concentrações dos poluentes, passadas e presentes, são utilizadas para prever as concentrações futuras. Esta previsão é possível, uma vez que as variáveis atmosféricas exibem uma associação estatística positiva com os seus valores passados ou futuros. Trata-se de um método que necessita de relativamente poucos conhecimentos, de desenvolvimento fácil e simples, que pode ser eficaz sob condições estáticas, mas é habitualmente ineficaz sob condições dinâmicas. Esta previsão é útil como ponto de partida e serve como linha orientadora de comparação para outros métodos, não devendo, no entanto, ser utilizado como modelo único de previsão;
- **método fenomenológico/intuitivo:** envolve a análise e o processamento da informação meteorológica e da qualidade do ar passada para formular a previsão futura. Trata-se de uma metodologia fortemente baseada na experiência de um meteorologista ou especialista dos fenómenos atmosféricos, devendo ser utilizado com outros métodos de previsão, uma vez que equilibra algumas das limitações dos métodos de previsão numéricos;
- **método climatológico:** baseia-se no estudo das condições extremas do clima para uma dada região para prever os níveis de poluentes no ar. São vulgarmente baseados em autocorrelações entre séries temporais de climatologia e concentração de poluentes [Robeson e Steyn, 1989]. Tratam-se de ferramentas que ajudam a orientar as previsões da qualidade do ar feitas por outros métodos, podendo ser úteis quando os outros métodos prevêem episódios extremos;

- **método “criteria”:** usa-se um valor (critério) de variáveis meteorológicas ou de qualidade do ar para prever as concentrações de poluentes. Assenta no facto de que, embora as alterações das emissões diárias possam afectar a qualidade do ar, são as variações climáticas ou meteorológicas que melhor explicam as alterações dia a dia nas concentrações dos poluentes. É mais eficaz a prever a probabilidade de uma excedência do que uma concentração exacta de um poluente, devendo, por isso, ser usado como um método primário de prognóstico ou combinado com outros métodos;
- **método de regressão linear:** são desenvolvidas equações de regressão de modo a descrever a relação entre a concentração de um poluente e variáveis de previsão (meteorológicas, entre outras) [Robeson e Steyn, 1990; Gardner e Dorling, 2000; Cogliani, 2001]. Trata-se de um método de relativamente fácil operação, envolvendo apenas o desenvolvimento das equações de regressão;
- **redes neuronais:** os níveis de poluição atmosférica são previstos através de algoritmos computacionais inicialmente desenvolvidos para simular redes biológicas neuronais, compostos por um conjunto não-linear de equações e factores de ponderação [Gardner e Dorling, 2000; Kolehmainen *et al.*, 2001]. Comparativamente com o desenvolvimento da rede, a sua operação é directa e requer poucos conhecimentos. É, no entanto, aconselhável que alguém com conhecimento dos processos meteorológicos e de qualidade do ar esteja envolvido no desenvolvimento do método e na avaliação das previsões.

Dos vários métodos estatísticos apresentados distinguem-se, pelo grau de exactidão moderado a alto, a regressão, as redes neuronais e o fenomenológico, apresentando os restantes métodos (persistência, climatológico e “criteria”) baixa ou moderada exactidão [USEPA, 1999].

Os modelos numéricos de previsão da qualidade do ar baseiam-se na descrição matemática e físico-química dos processos atmosféricos que influenciam as concentrações dos poluentes (incluindo o transporte, a dispersão e a química) e no uso de algoritmos computacionais para a sua resolução. De um modo geral, um modelo numérico de qualidade do ar integra e processa a informação meteorológica, as emissões e a química para estimar o estado físico e químico da atmosfera num tempo futuro. Os dados de entrada, meteorológicos e de emissões, são também obtidos através de modelos de prognóstico.

É de salientar que se trata do único método utilizado para a previsão da qualidade do ar que considera, como dados de entrada, as emissões atmosféricas, parâmetro fundamental na gestão da qualidade do ar. Este método envolve, no entanto, recursos computacionais e humanos consideráveis, necessários para estabelecer um sistema de previsão credível e automatizado de meteorologia, emissões e qualidade do ar.

### 6.1.1 Enquadramento mundial e nacional

A pesquisa bibliográfica revelou que já existe, numa série de países, paralelamente à previsão meteorológica, a previsão operacional da qualidade do ar. Esta previsão é, em muitos casos, feita recorrendo a um Índice de Qualidade do Ar (IQA), parâmetro estatístico que permite uniformizar o fornecimento da informação ao público sobre o estado da qualidade do ar e os seus efeitos associados na saúde humana, sendo geralmente divulgada através da Internet [USEPA, 1999].

Os modelos numéricos de qualidade do ar têm sido desenvolvidos e aplicados usando dados de entrada de prognóstico meteorológico para prever as concentrações diárias dos poluentes atmosféricos [Vautard *et al.*, 2001; Hess *et al.*, 2001; Chevenez e Jensen, 2001; Jakobs *et al.*, 2002; Jiménez *et al.*, 2006; etc], existindo múltiplos exemplos onde se pode encontrar a aplicação de um sistema numérico de previsão da meteorologia e qualidade do ar e a sua divulgação ao público [URL11,12,13,14,15,16,17].

Os métodos estatísticos, apesar de estarem sujeitos a severas críticas uma vez que os processos físicos e químicos subjacentes são dificilmente explicados através de modelos lineares, têm sido utilizados em vários países com um índice de eficiência bastante satisfatório como, por exemplo, nos Estados Unidos da América e no Chile [USEPA, 1999].

Tal como já referido, estabelecer a melhor metodologia para prever a qualidade do ar em Portugal passa pela avaliação e selecção do método de previsão mais adequado para o caso de estudo. Os métodos estatísticos são de fácil desenvolvimento e operação, estando, no entanto, fortemente dependentes de dados históricos, quer meteorológicos, quer de qualidade do ar, o que limita a sua aplicabilidade apenas a zonas abrangidas pela monitorização [USEPA, 1999; Veloso *et al.*, 2004]. Atendendo às características e distribuição espacial das redes de monitorização da qualidade do ar em Portugal, os métodos estatísticos não são os mais aconselháveis ao nível nacional. A modelação numérica determinística surge como o método mais adequado de previsão, não dependente de dados históricos e permitindo ainda o conhecimento da origem dos episódios de poluição e a inclusão dos dados de emissões, factores essenciais para uma correcta gestão da qualidade do ar.

Independentemente do sistema de previsão seleccionado, é indispensável a implementação de procedimentos de garantia e controlo da qualidade dos modelos para assegurar o seu bom funcionamento [Borrego *et al.*, 2003a].

Em seguida são apresentadas as duas abordagens usadas neste estudo para a previsão da qualidade do ar, primeiro ao nível urbano (Lisboa e Porto), usando métodos estatísticos, e posteriormente ao nível nacional, recorrendo ao sistema de modelação numérica anteriormente descrito.

## 6.2 Previsão estatística para Lisboa e Porto

Em Portugal existem apenas duas aglomerações - Lisboa e Vale do Tejo e Porto Litoral - que possuem uma rede de monitorização da qualidade do ar suficientemente densa e histórica que permite a criação das duas séries de dados necessárias para a previsão estatística: uma série de desenvolvimento e uma série de validação [USEPA, 1999]. Dado tratarem-se de duas áreas particularmente afectadas pela poluição atmosférica, justifica-se o desenvolvimento e aplicação/teste de um modelo estatístico de regressão linear para a previsão da qualidade do ar em cada uma destas aglomerações. Esta previsão da qualidade do ar focalizou-se, tal como na fase de diagnóstico, nos dois poluentes mais críticos,  $O_3$  e  $PM_{10}$  [Veloso *et al.*, 2004].

### 6.2.1 Selecção das variáveis de previsão

Uma vez que o objectivo é o desenvolvimento de equações de regressão que descrevam a relação linear entre a concentração de um poluente e outras variáveis de previsão, em particular, meteorológicas, foi seleccionado um conjunto de estações de monitorização meteorológica e de qualidade do ar para base deste trabalho. A Figura 6.1 assinala a localização das estações meteorológicas e de qualidade do ar existentes nas cidades de Lisboa e Porto, e as futuras relações estabelecidas entre elas.

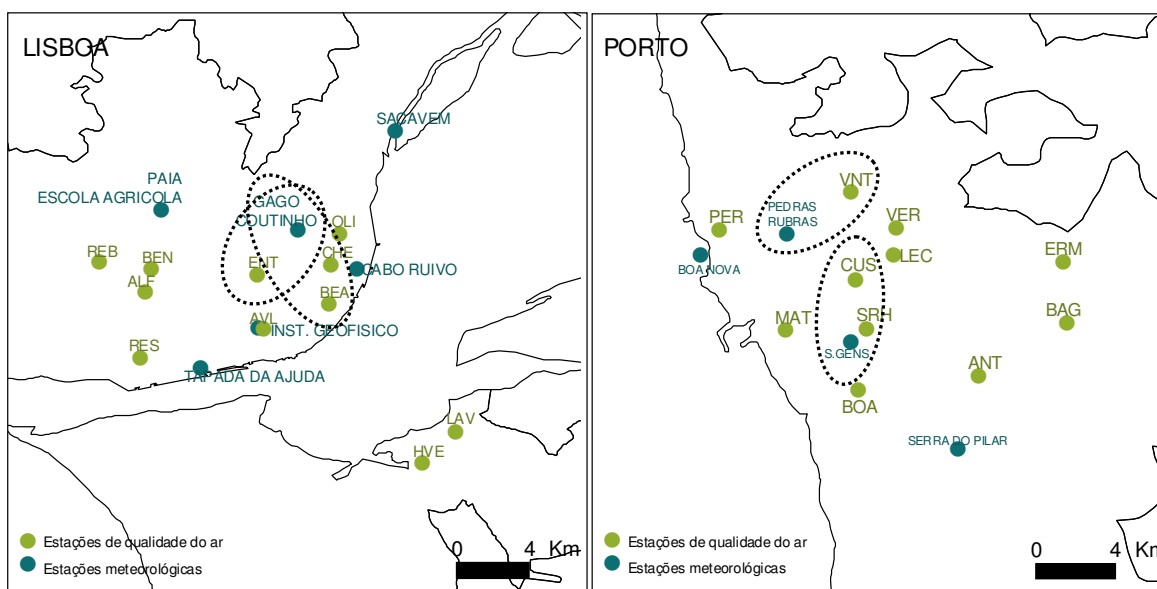


Figura 6.1. Mapa de localização das estações meteorológicas e de qualidade do ar para as regiões de Lisboa e Porto, e futuras associações consideradas (a tracejado)



O critério de selecção das estações de qualidade do ar para este estudo recaiu no tipo de estação, bem como na percentagem de dados disponíveis de cada uma, tendo como referência o valor mínimo de eficiência de 85%.

Com base nestes critérios foi seleccionada uma série temporal contínua, dos dois poluentes em estudo, entre 1999 e 2002 para 3 estações de qualidade do ar em Lisboa e 2 no Porto. Relativamente à cidade de Lisboa, escolheram-se as estações da Avenida da Liberdade e de Entrecampos, ambas classificadas como urbana de tráfego, e a estação urbana de fundo do Beato, todas elas localizadas na aglomeração AML Norte. No Porto, a escolha recaiu nas estações de Vila Nova da Telha e Custóias, ambas suburbanas mas com carácter de fundo e industrial, respectivamente [APA, URL18].

A selecção das estações meteorológicas teve como critério a proximidade geográfica relativamente às estações de qualidade do ar. No entanto, uma análise comparativa entre as estações seleccionadas permitiu concluir que, tanto para a cidade de Lisboa como no Porto, existe uma uniformidade relativamente elevada na medição das diversas variáveis meteorológicas. A tracejado, na Figura 6.1, estão assinaladas as relações estabelecidas entre as estações meteorológicas e de qualidade do ar: na cidade de Lisboa, a estação meteorológica de Gago Coutinho foi usada com as estações de qualidade do ar do Beato e Entrecampos; no Porto, correlacionou-se a estação meteorológica de Pedras Rubras e a de Porto S. Gens, com Vila Nova da Telha e Custóias, respectivamente.

A operacionalização do modelo estatístico requer a aplicação de um programa computacional ou duma folha de cálculo que contenha as equações de regressão. O “software” estatístico utilizado foi o SPSS (“Statistical Package for the Social Sciences”) que permite obter uma equação de regressão e respectivo coeficiente de correlação após a introdução dos dados de entrada (variáveis dependentes e independentes). Efectua, também, uma selecção das variáveis de entrada mais relevantes, isto é, selecciona-as através da análise do seu grau de significância em relação à variável dependente, usando o método “stepwise”. Neste método as variáveis são introduzidas uma a uma, sendo em cada passo feita uma análise das variáveis independentes já introduzidas, para garantir que permanecem relevantes após a introdução da nova variável.

A escolha das variáveis de entrada foi feita com base no conhecimento da influência das diferentes variáveis meteorológicas na concentração de poluentes, entre elas: a temperatura, a humidade relativa, a precipitação, a radiação solar e a velocidade e direcção do vento [Cogliani, 2001].

No que diz respeito ao ozono, esta análise permitiu concluir que as variáveis de maior relevo são a temperatura, a humidade relativa e a velocidade do vento. A temperatura influencia positivamente a formação de ozono, uma vez que temperaturas elevadas propiciam elevadas taxas de reacções fotoquímicas, podendo também afectar as emissões de COVs, quer naturais, quer antropogénicas. Ao contrário da temperatura, tanto a humidade relativa como a velocidade do vento têm um efeito

negativo. De facto, sistemas de alta pressão, que conduzem a céu limpo, elevadas temperaturas, baixa humidade e vento fraco são geralmente acompanhados por períodos de elevadas concentrações de ozono [Thompson *et al.*, 2001], pois estão reunidas as condições para a acumulação de precursores de  $O_3$  (fraca dispersão) e da cinética química favorável à sua produção.

Relativamente às partículas, as variáveis meteorológicas que apresentam uma maior correlação são o vento (velocidade e direcção), a precipitação e a temperatura. Esta última tem influência ao nível das reacções químicas, da estabilidade da atmosfera e, quando associada a condições de tempo seco, promove as contribuições naturais deste poluente. A precipitação é um processo de remoção húmida, que diminui a concentração de partículas em suspensão na atmosfera. A velocidade do vento determina o grau de mistura e dispersão de poluentes na atmosfera, enquanto a sua direcção permite determinar a origem das massas de ar e, logo, inferir da sua composição.

As variáveis de entrada seleccionadas para cada poluente, condicionadas pela sua disponibilidade nas diversas estações meteorológicas e consequente análise da sua correlação parcial com a concentração de poluente, estão resumidas na Tabela 6.1. Foi ainda introduzida uma variável “persistência”, quer para o ozono, quer para as partículas, denominada “O3 dA” e “PT dA”, respectivamente, devido à elevada probabilidade da concentração do dia anterior se manter no dia seguinte [USEPA, 2004]. A sua inclusão como variável independente aumentou significativamente os valores dos coeficientes de regressão.

Tabela 6.1. Variáveis de entrada utilizadas para obtenção das equações de regressão.

Poluente	Variável	Nome da variável
Ozono	O3 dA	Concentração (máxima) observada no dia anterior
	HR	Humidade Relativa
	Vvento	Velocidade do vento
	Tmax	Temperatura máxima diária
	Td max	Temperatura do ponto de orvalho máxima diária (apenas para Lisboa)
Partículas	PT dA	Concentração observada no dia anterior
	HR	Humidade relativa
	Tmax	Temperatura máxima diária
	Vvento	Velocidade do vento

### 6.2.2 Modelo de regressão linear múltipla e sua validação

De acordo com a bibliografia [USEPA, 1999], seleccionaram-se dois anos para a obtenção das equações de regressão, baseados nas melhores correlações parciais calculadas (entre a concentração de poluente e as variáveis meteorológicas) e na manipulação de diferentes possibilidades no SPSS. Os restantes dois anos foram usados na validação do modelo de regressão. As equações desenvolvidas e a sua respectiva validação são apresentadas de seguida.

#### 6.2.2.1 Ozono

Na Tabela 6.2 estão apresentados os vários modelos de regressão múltipla obtidos para o ozono através do programa SPSS, respectivo coeficiente de regressão ( $r$ ) e erro sistemático médio (BIAS). Para Lisboa obtiveram-se três equações de regressão elaboradas com base em médias horárias (LH) e três com base em médias octo-horárias (LO).

Para o Porto foi desenvolvida uma equação de regressão com médias horárias (PH) e duas com médias octo-horárias (PO). Para cada equação estão indicadas as estações de qualidade do ar e os anos usados na sua elaboração.

As correlações parciais obtidas entre a concentração de  $O_3$  e as variáveis independentes em estudo são listadas no Anexo V, para as várias estações.

Tabela 6.2. Modelos de regressão múltipla obtidos para o  $O_3$ , para Lisboa e Porto.

<b>LISBOA</b> <b>Anos/estações</b>	<b>Modelo de regressão múltipla</b>	<b>r</b>	<b>BIAS</b> ( $\mu g m^{-3}$ )
BEA/ENT 00/01	<b>LH1:</b> $0,709 \cdot O_3 \text{ dA} - 0,379 \cdot HR + 0,256 \cdot V_{\text{vento}} + 43,649$	0,80	-0,50
BEA/ENT 01/02	<b>LH2:</b> $0,673 \cdot O_3 \text{ dA} - 0,431 \cdot HR + 0,373 \cdot V_{\text{vento}} + 49,733$	0,79	-3,21
BEA/ENT 01/02	<b>LH3:</b> $0,669 \cdot O_3 \text{ dA} + 0,316 \cdot Td \text{ max} + 0,38 \cdot V_{\text{vento}} - 0,449 \cdot HR - 47,021$	0,79	-3,07
BEA/ENT 01/02	<b>LO1:</b> $0,693 \cdot O_3 \text{ dA} - 0,393 \cdot HR + 0,68 \cdot V_{\text{vento}} + 38,308$	0,82	-2,47
BEA/ENT 01/02	<b>LO2:</b> $0,69 \cdot O_3 \text{ dA} - 0,407 \cdot HR + 0,686 \cdot V_{\text{vento}} + 0,255 \cdot Td \text{ max} + 36,015$	0,83	-2,33
BEA/ENT 00/01	<b>LO3:</b> $0,741 \cdot O_3 \text{ dA} - 0,319 \cdot HR + 0,559 \cdot V_{\text{vento}} + 30,72$	0,83	-0,36
<b>PORTO</b> <b>Anos/estações</b>	<b>Modelo de regressão múltipla</b>	<b>r</b>	<b>BIAS</b> ( $\mu g m^{-3}$ )
VNT 01/02 CUS 99/00	<b>PH1:</b> $0,519 \cdot O_3 \text{ dA} + 1,515 \cdot T_{\text{max}} - 0,244 \cdot HR + 25,108$	0,73	0,79
VNT/CUS 01/02	<b>PO1:</b> $0,706 \cdot O_3 \text{ dA} + 0,579 \cdot T_{\text{max}} - 0,251 \cdot HR + 0,363 \cdot V_{\text{vento}} + 22,817$	0,81	-0,03
VNT 99/01 CUS 01/02	<b>PO2:</b> $0,714 \cdot O_3 \text{ dA} + 0,569 \cdot T_{\text{max}} - 0,219 \cdot HR + 0,418 \cdot V_{\text{vento}} + 19,103$	0,81	0,67

A análise dos vários modelos de regressão revela a influência da concentração do dia anterior nos níveis previstos para o ozono. Para além desta, a humidade relativa e a velocidade do vento são variáveis presentes em todos os modelos. É de salientar, no entanto, a diferente relevância do factor “Temperatura” (máxima) entre Lisboa e Porto. A ausência desta variável nas equações de regressão de Lisboa e a maior correlação parcial com a velocidade do vento revelam a importância da advecção no processo de formação do  $O_3$  nesta região.

Torna-se necessário testar estas equações relativamente às restantes estações de qualidade do ar existentes na cidade de forma a propor uma equação de regressão global a nível urbano. Na Tabela 6.3 e 6.4 é apresentado, para cada estação-teste das possíveis equações, o erro sistemático médio (BIAS), para Lisboa e Porto, respectivamente.

Em relação a Lisboa, a estação meteorológica usada nos testes continua a ser a de Gago Coutinho. No caso do Porto, testaram-se duas estações meteorológicas para avaliar, nos casos em que se encontram a distâncias semelhantes das estações de qualidade do ar, a variação do valor BIAS. As estações de Vermoim e Leça do Balio indicam melhores correlações quando se utiliza a estação de Porto S. Gens e Pedras Rubras, respectivamente, apesar de se usarem anos diferentes na validação efectuada.

A validação das equações de regressão múltipla para o  $O_3$  teve por base apenas o cálculo do erro sistemático médio (BIAS), dado que todas apresentaram coeficientes de regressão da ordem de 0,8 e porque, para além disso, não foi possível determinar a probabilidade de detecção e a percentagem de falsos alarmes por terem sido registadas poucas excedências ao limiar horário de  $O_3$  ( $180 \mu g m^{-3}$ ). A escolha das melhores equações baseou-se no equilíbrio entre o menor BIAS da própria equação e o maior número das restantes estações de qualidade do ar com ela testadas com menor BIAS associado. A equação mais adequada para Lisboa é a LH1 para os valores horários e a LO3 para os octo-horários. Para a cidade do Porto a escolha recaiu na única equação horária existente (PH1) e na PO1 para os valores octo-horários (Tabela 6.2).

Tabela 6.3. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste de Lisboa, para  $O_3$ .

LISBOA		Tipo Influência/Ambiente	BIAS (µg m <sup>-3</sup> )					
Estação Qualidade do ar			LH1	LH2	LH3	LO1	LO2	LO3
1999	Hospital Velho	Tráfego/Urbana	-1,63	-3,20	-3,16	-3,30	-3,26	-1,95
2000	Lavradio	Industrial /Suburbana	-2,33	-3,95	-3,83	-2,48	-2,35	-1,23
2001	Laranjeiro	Fundo /Urbana	4,25	4,27	4,33	6,74	6,82	6,39
	Reboleira	Fundo /Urbana	5,74	5,85	5,91	9,15	9,23	8,44
	Paio Pires	Fundo /Urbana	5,24	5,27	5,37	7,86	7,95	7,34
	Alfragide	Fundo /Suburbana	10,88	11,58	11,80	-11,58	14,11	12,48
2002	Olivais	Fundo /Urbana	4,00	3,05	2,91	3,14	2,61	2,72
	Loures	Fundo /Urbana	2,40	1,32	1,33	2,17	1,64	1,61
	Restelo	Fundo /Urbana	5,62	4,88	4,82	4,68	4,51	4,54
	Escavadeira	Industrial /Urbana	-3,39	-5,15	-5,11	-2,12	-3,41	-3,47

Tabela 6.4. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste do Porto, para O<sub>3</sub>.

PORTO		Tipo Influência/Ambiente	Estação Meteorológica	BIAS ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )		
Estação	Qualidade do ar			PH1	PO1	PO2
1999	Baguim	Tráfego /Suburbana	Porto S. Gens	-3,02	-1,19	-0,67
	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Porto S. Gens	-1,44	1,26	1,74
2000	Baguim	Tráfego /Suburbana	Porto S. Gens	3,65	-1,21	-0,66
	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Pedras Rubras	-2,02	-2,03	-1,63
	Paranhos	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	-15,37	-7,98	-7,25
2001	R. dos Bragas	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	-1,28	-5,18	-4,69
	Formosa	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	-4,20	-5,76	-8,07
	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Porto S. Gens	-2,28	-0,22	0,20
	Vermoim	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	-10,92	-8,88	-8,18
	Boavista	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	-17,48	-12,72	-11,86
	Leça Balio	Fundo /Rural	Porto S. Gens	-6,14	-1,55	-1,04
2002	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Pedras Rubras	-3,81	-2,88	-2,46
	Formosa	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	-0,48	1,09	1,53
	Vermoim	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	-5,50	-1,55	-1,05
	Boavista	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	-8,80	-6,19	-5,71
	Antas	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	-6,70	-2,60	-2,10
	Leça Balio	Fundo /Rural	Pedras Rubras	-0,26	-0,75	-0,39

Na Figura 6.2 e 6.3 apresenta-se a comparação entre os valores observados e previstos para a série temporal total usada (4 anos), compreendendo os dois anos usados para a elaboração da equação de regressão e os dois restantes usados apenas para a validação da previsão.

Ambas as figuras ilustram uma satisfatória sobreposição dos valores observados e previstos para cada equação de regressão seleccionada, apesar da subestimativa dos máximos de concentração observados.

A sistemática subestimativa dos picos de ozono denuncia a não inclusão de determinados fenómenos na formulação do modelo de regressão múltipla. As condições de mistura vertical e as emissões atmosféricas são exemplos de processos responsáveis pela formação de elevadas concentrações de ozono que não são tidos em conta no modelo estatístico e que poderão estar na origem dos desvios verificados.

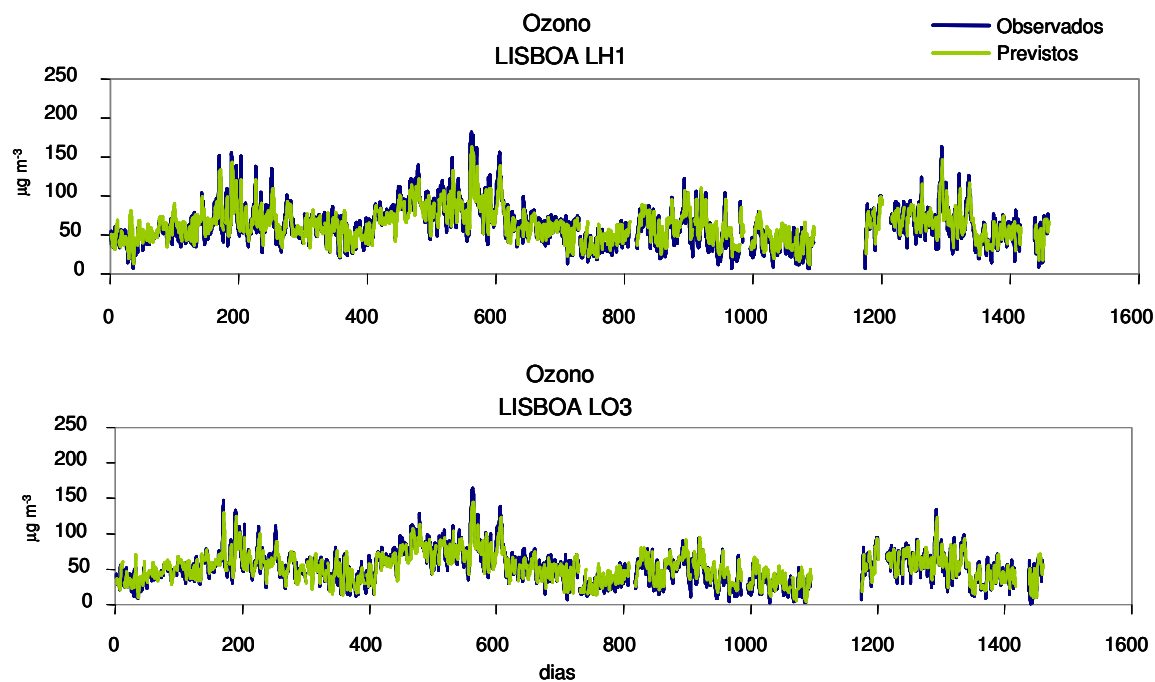


Figura 6.2. Representação gráfica das concentrações de  $\text{O}_3$  observadas *versus* previstas para LH1 e LO3.

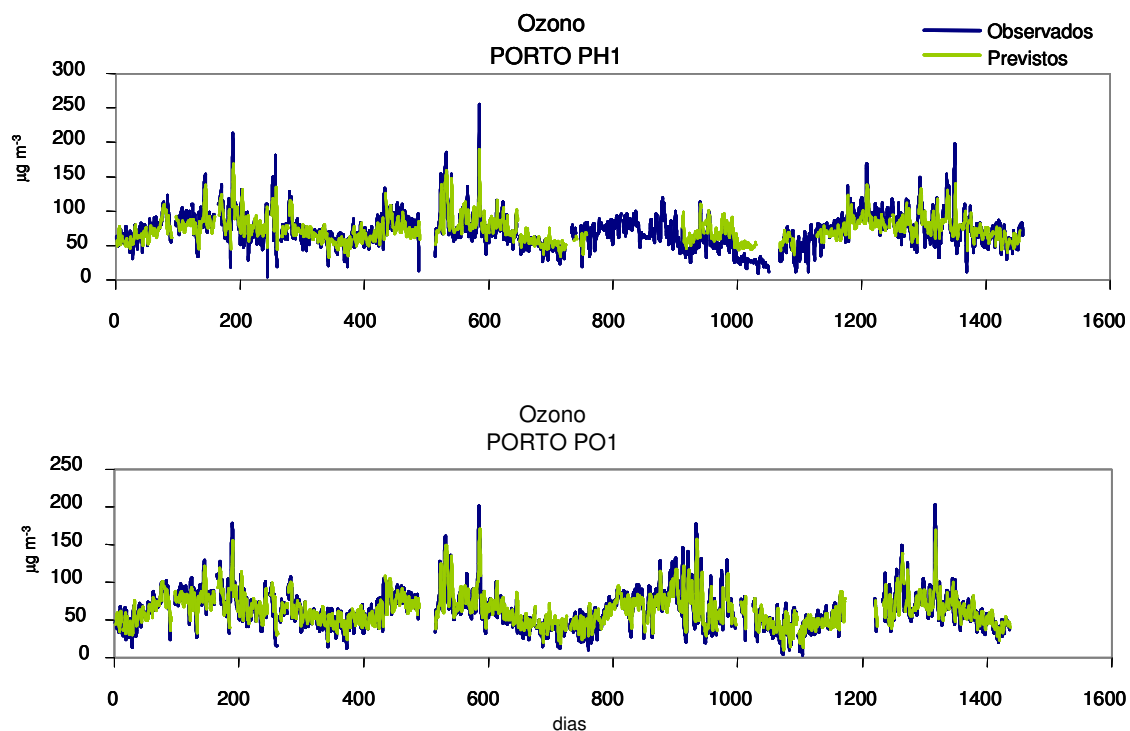


Figura 6.3. Representação gráfica das concentrações de  $\text{O}_3$  observadas *versus* previstas para PH1 e PO1.

## 6.2.2.2 Partículas

Para as partículas procedeu-se igualmente a vários testes para a obtenção de uma regressão múltipla. Apesar da complexa e variada composição química das  $PM_{10}$ , os resultados obtidos foram satisfatórios após a introdução da variável de entrada correspondente à concentração do dia anterior. Obtiveram-se 3 equações de regressão para Lisboa e 2 para o Porto, com coeficientes de regressão superiores a 0,7 (Tabela 6.5). Tal como para o ozono, as correlações parciais obtidas entre a concentração de  $PM_{10}$  e as variáveis independentes em estudo são listadas no Anexo V, para as várias estações.

Tabela 6.5. Modelos de regressão múltipla obtidos para as  $PM_{10}$ , para Lisboa e Porto.

<b>LISBOA</b> <b>Anos/estações</b>	<b>Modelo de regressão múltipla</b>	<b>r</b>	<b>BIAS (<math>\mu g m^{-3}</math>)</b>
BEA/ENT 99/01	<b>L1:</b> $0,675 \cdot PT \text{ dA} - 1,115 \cdot V_{\text{vento}} + 28,043$	0,77	-2,25
BEA/ENT 99/01	<b>L2:</b> $0,671 \cdot PT \text{ dA} - 1,178 \cdot V_{\text{vento}} - 0,118 \cdot HR + 37,654$	0,78	-2,24
BEA/ENT 99/01	<b>L3:</b> $0,637 \cdot PT \text{ dA} - 1,150 \cdot V_{\text{vento}} + 0,482 \cdot T_{\text{max}} + 22,303$	0,78	0,53
<b>PORTO</b> <b>Anos/estações</b>	<b>Modelo de regressão múltipla</b>	<b>r</b>	<b>BIAS (<math>\mu g m^{-3}</math>)</b>
VNT 00/01 CUS 99/01	<b>P1:</b> $0,64 \cdot PT \text{ dA} - 0,918 \cdot V_{\text{vento}} - 0,250 \cdot HR + 40,488$	0,73	-1,64
VNT 00/01 CUS 99/01	<b>P2:</b> $0,637 \cdot PT \text{ dA} - 1,021 \cdot V_{\text{vento}} - 0,255 \cdot HR - 0,248 \cdot T_{\text{max}} + 45,645$	0,73	-2,86

Testaram-se, também para as partículas, as equações obtidas com as restantes estações de qualidade do ar disponíveis, variando-se a estação meteorológica usada quando a distância não era significativamente diferente (Tabela 6.6 e Tabela 6.7). Para Lisboa não se verificaram alterações significativas na grandeza dos desvios sistemáticos. No entanto, para o Porto, as estações de Vermoim e Leça do Balio indicam BIAS mais baixos quando utilizadas as estações meteorológicas de Porto S. Gens e Pedras Rubras, respectivamente. No caso da estação de Ermesinde, a variação da estação meteorológica usada não revelou consistência no que diz respeito aos erros.

Relativamente a Lisboa, embora o melhor coeficiente de regressão e erro sistemático médio recaiam sobre a terceira equação apresentada, quando se efectuou o estudo com as restantes estações de qualidade do ar da cidade verificou-se que, de entre as três equações, a segunda era a que apresentava valores de BIAS inferiores. Tendo como prioridade a cidade na sua globalidade, a equação escolhida para Lisboa é a L2. Para a cidade do Porto a opção foi mais evidente, no que diz respeito a valores, dado que a equação que apresenta um maior coeficiente de correlação e menor BIAS é a que consegue oferecer, no teste para as restantes estações de qualidade do ar na zona do Porto, os menores erros. Assim, a equação de regressão P1 foi escolhida para a cidade do Porto.

Tabela 6.6. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste de Lisboa, para PM<sub>10</sub>.

LISBOA		Tipo Influência/Ambiente	Estação Meteorológica	BIAS ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )		
Estação Qualidade do ar				L1	L2	L3
2000	Olivais	Fundo /Urbana	Gago Coutinho	-4,74	-4,70	-7,58
2001	Olivais	Fundo /Urbana	Gago Coutinho	-2,70	-2,58	-10,57
	Lavradio	Industrial /Suburbana	Gago Coutinho	-3,33	-3,28	-2,06
	Laranjeiro	Fundo /Urbana	Instituto Geofísico	0,68	0,06	-1,70
	Reboleira	Fundo /Urbana	Gago Coutinho	-2,70	-2,58	-2,16
2002	Olivais	Fundo /Urbana	Gago Coutinho	-4,86	-4,60	-7,70
	Lavradio	Industrial /Suburbana	Instituto Geofísico	-1,74	-1,71	-5,14
	Laranjeiro	Fundo /Urbana	Instituto Geofísico	-3,33	-3,46	-13,59
	Reboleira	Fundo /Urbana	Instituto Geofísico	-2,84	-2,97	-7,43
	Loures	Fundo /Urbana	Gago Coutinho	-1,96	-1,65	-4,42
	Escavadeira	Industrial/Urbana	Instituto Geofísico	-1,71	-1,50	-4,74

Tabela 6.7. Validação estatística das equações de regressão para cada estação-teste do Porto, para PM<sub>10</sub>.

PORTO		Tipo Influência/Ambiente	Estação Meteorológica	BIAS (µg m <sup>-3</sup> )	
Estação Qualidade do ar				P1	P2
1999	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Pedras Rubras	4,23	5,41
2000	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Porto S. Gens	-0,67	0,29
	Paranhos	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	1,33	2,32
2001	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Porto S. Gens	6,57	7,86
	Vermoim	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	10,68	11,87
	Boavista	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	11,10	12,33
	Leça Bailio	Fundo /Rural	Porto S. Gens	10,43	11,86
2002	Ermesinde	Fundo /Suburbana	Pedras Rubras	3,76	4,99
	Vermoim	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	0,57	1,62
	Boavista	Tráfego /Urbana	Pedras Rubras	7,72	8,99
	Antas	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	6,55	5,23
	Sra Hora	Tráfego /Urbana	Porto S. Gens	5,48	6,53
	Leça Bailio	Fundo /Rural	Pedras Rubras	4,43	5,68

Salienta-se ainda as discrepâncias encontradas no desvio BIAS na validação da mesma estação de qualidade do ar (e igual estação meteorológica) para diferentes anos. A estação do Laranjeiro, em Lisboa, e a de Ermesinde, no Porto, são exemplos ilustrativos desta diferença.

Na Tabela 6.8 apresentam-se os resultados relativos aos testes de percentagem de Falsos Alarmes (FA) e Probabilidade de Detecção (PD). Estes testes não foram determinantes na escolha no caso de Lisboa, visto apresentarem contradição de valores: L1 com a melhor FA e a pior PD e L3 com a pior FA e a melhor PD, figurando a L2 como a que apresenta valores médios para ambos os testes. Pelo contrário, para o Porto, os valores são concordantes, sendo a P1 que apresenta as melhores percentagens em ambos os testes efectuados, o que vem confirmar a decisão tomada.



Tabela 6.8. Probabilidade de detecção e de falsos alarmes na previsão de  $PM_{10}$ .

Cidade		Probabilidade de detecção (%)	Percentagem falsos alarmes (%)
Lisboa	L1	67	24
	L2	69	29
	L3	72	30
Porto	P1	61	28
	P2	58	29

A Figura 6.4 evidencia, para as partículas, um bom nível de sobreposição dos dados observados e previstos ao longo dos 4 anos de séries de dados, tal como no caso do ozono.

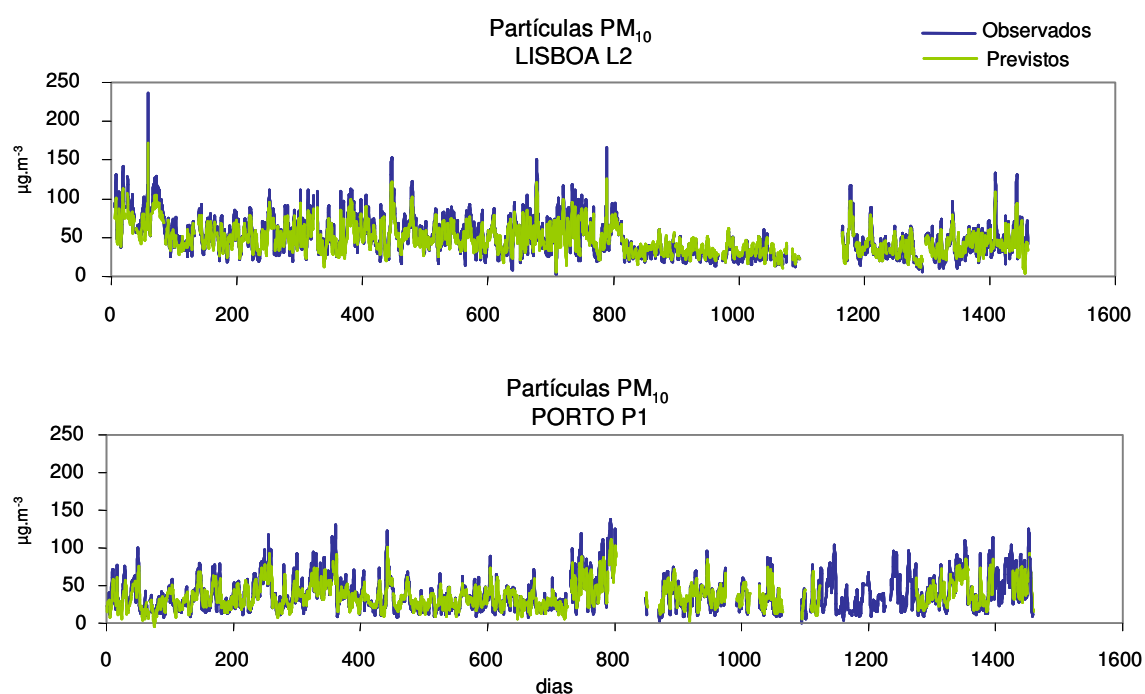


Figura 6.4. Representações gráficas dos valores observados vs previstos para L2 e P1.

Com o intuito de analisar o comportamento das várias equações de regressão escolhidas num intervalo temporal de previsão mais alargado, procedeu-se a um teste para três dias (período de tempo de fiabilidade das previsões meteorológicas), em que a concentração observada no dia anterior, como variável de entrada, foi substituída pela concentração prevista para o dia anterior, obtida pela própria equação. O erro associado a cada dia de previsão foi calculado por comparação entre os valores previstos e os observados para os respectivos dias (Tabela 6.9).

Os baixos valores de BIAS encontrados revelam que as equações de regressão obtidas são eficazes na previsão de três dias, apesar de uma significativa subestimativa das concentrações de partículas, indicada pelo valor positivo deste desvio, que aumenta ao longo dos dias previstos.

Tabela 6.9. Erro sistemático médio calculado para cada equação de regressão na previsão para três dias.

Poluente	Equação regressão	BIAS ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )		
		1º dia	2º dia	3º dia
Ozono	LH1	-0,94	-1,29	-1,57
	LO3	-0,81	-1,05	-1,26
	PH1	-0,93	-1,16	-1,27
	PH2	-0,69	-0,92	-0,96
Partículas	L2	3,24	4,12	4,71
	P1	2,54	3,17	3,27

Resumindo, pode-se afirmar que os resultados obtidos nesta previsão estatística foram satisfatórios. Apesar de não ter sido viável a obtenção de um modelo de previsão exclusivamente dependente de condições meteorológicas, dado o reduzido coeficiente de regressão associado (ordem de 0,5) e os erros inerentes bastante elevados, a introdução da variável de entrada referente à concentração observada no dia anterior veio resolver significativamente essa questão.

As equações de regressão linear múltipla estabelecidas permitiram prever as concentrações de  $\text{O}_3$  e  $\text{PM}_{10}$  com coeficientes de regressão bastante satisfatórios (superiores para o ozono) e com uma aplicação aceitável na quase totalidade da extensão de cada cidade, sendo capazes de responder a uma análise legislativa. Verificou-se serem também eficientes numa previsão temporal mais alargada (três dias). O facto da correlação estatística e o sucesso da previsão ser maior para o ozono pode ser explicado pelos parâmetros meteorológicos (variáveis independentes do modelo de regressão) serem um factor determinante na formação deste poluente, ao contrário das partículas, poluente primário, cuja concentração depende directamente dos níveis de emissão, variável não tida em conta na regressão estatística.

O estudo apresentado constituiu um primeiro passo para a previsão estatística da qualidade do ar ao nível urbano, tendo sido um ponto de partida para outras investigações nesta área, algumas em actual estado de aplicação e desenvolvimento [Marques *et al.*, 2007].

## 6.3 Sistema de previsão numérica para Portugal

Um dos objectivos propostos neste trabalho é a realização da previsão da qualidade do ar para Portugal Continental. Dada a limitação da previsão estatística na dependência de dados monitorizados, foi desenvolvido um sistema de modelação numérica para efectuar o prognóstico operacional das concentrações de poluentes atmosféricos para todo o país. Neste âmbito, é aconselhável usar modelos químicos com mecanismos que traduzam a química detalhada da atmosfera num conjunto mínimo de reacções, para facilitar a sua operacionalização, e que permitam a introdução da variabilidade, tanto das condições iniciais e fronteira, como das próprias emissões [Backlanov, 2006]. Assim sendo, foi seleccionado o mesmo sistema de modelação MM5-CHIMERE (descrito no Capítulo 3), e realizada a sua adaptação para o funcionamento automático com vista à previsão em tempo real.

A sua operacionalização foi iniciada no Verão de 2004 [Monteiro *et al.*, 2005b], com a simulação apenas de espécies gasosas e focalizada no ozono troposférico, tendo sido posteriormente estendida para as partículas a partir de 2006 [Monteiro *et al.*, 2007c]. O primeiro ano de funcionamento de cada uma destas etapas constituiu uma fase experimental, pretendendo-se uma avaliação consistente do desempenho do sistema de previsão. Esta foi divulgada ao público no início de 2007, apesar da previsão do ozono ter sido disponibilizada desde 2006.

### 6.3.1 Descrição do sistema numérico de previsão

O modelo meteorológico de mesoscala MM5 [Dudhia, 1993; NCAR, URL1] é inicializado com dados de previsão globais do NCEP [NCEP, URL19] e utilizado como forçamento meteorológico para o modelo químico de transporte CHIMERE, na sua versão mais simplificada (que inclui a química dos aerossóis) com vista a uma maior rapidez na operacionalização [Monteiro *et al.*, 2005b].

Este foi aplicado, tal como para a avaliação de longo prazo, primeiro à escala europeia (com uma resolução de malha de 50 x 50 km<sup>2</sup>), e de seguida, através de uma técnica de “nesting” unidireccional, é efectuada uma simulação de maior resolução (10 x 10 km<sup>2</sup>) para o domínio de Portugal Continental (ver Secção 3.2.1 e 3.2.2).

Os inventários de emissões usados, em ambas as simulações, reportam-se à última actualização disponível, sendo estes dados substituídos por outros mais recentes após a actualização do respectivo inventário (EMEP para a escala europeia e INERPA para Portugal). No caso do período experimental analisado (2006-2007) os dados de emissões reportam-se ao ano 2003, tanto para o domínio europeu [EMEP, URL7], como ao nível nacional [IA, 2005b].

A Figura 6.5 mostra um esquema simplificado do sistema de modelos.

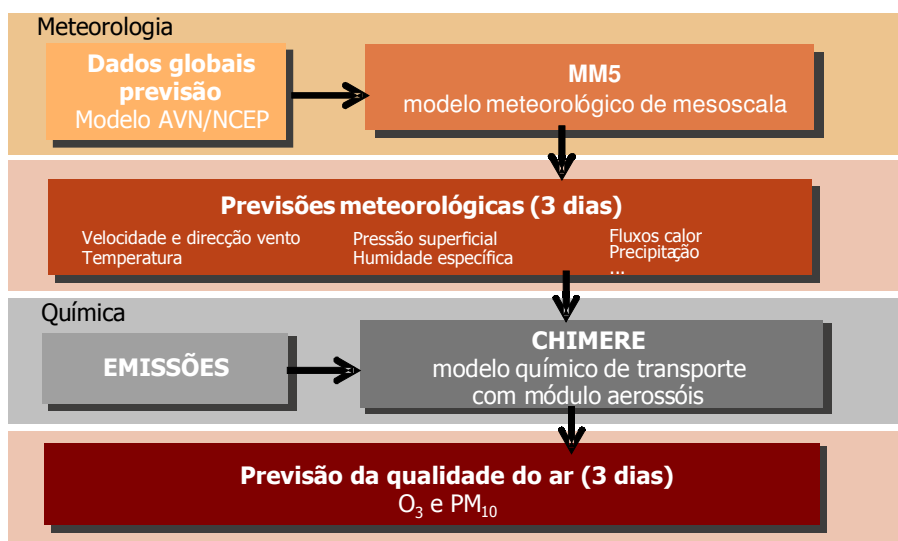


Figura 6.5. Esquema de funcionamento do sistema de modelos da previsão da qualidade do ar.

A qualidade do ar prevista é expressa em termos do índice de qualidade do ar, idêntico ao usado pela APA e divulgado na QualAr [APA, URL18]. Este índice foi desenvolvido de modo a traduzir a qualidade do ar de uma forma simples e compreensível, de fácil acesso do público, e dando resposta às obrigações legais. É calculado para cada poluente separadamente, de acordo com os valores limite legislados para a protecção da saúde humana, estando o seu valor associado a uma escala de cores (do verde ao vermelho). O índice varia de “Muito Bom” a “Mau” para cada poluente de acordo com a matriz de classificação apresentada na Tabela 6.10.

Tabela 6.10. Classificação do Índice de Qualidade do Ar proposto pela APA [APA, URL18].

Poluente/ classificação	PM <sub>10</sub> média diária ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )		O <sub>3</sub> máxima diária ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	
	Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
Mau	120	-----	240	-----
Fraco	50	119	180	239
Médio	35	49	120	179
Bom	20	34	60	119
Muito Bom	0	19	0	59

A classificação de “Fraca” e “Má” qualidade do ar é atribuída, no caso do ozono, quando as concentrações máximas esperadas são superiores ao limiar de informação e alerta ao público, respectivamente. No caso das partículas, esta mesma classificação é dada quando a média diária prevista é superior a  $50 \mu\text{g m}^{-3}$  e  $120 \mu\text{g m}^{-3}$ , respectivamente. Para além destes, é ainda previsto um índice global, cuja cor é dada pelo pior índice individual.

### 6.3.2 Operacionalização do sistema numérico de previsão

O sistema de modelos foi implementado numa arquitectura informática do tipo “cluster”, constituída por dois nós e um disco RAID de armazenamento externo, tendo em conta o funcionamento diário e a sua operacionalização automática. Cada um dos nós é composto por dois processadores XEON - 3.0 GHz, com 2 Gb de memória, 500 Gb de espaço de armazenamento e sistema operativo LINUX. O disco de armazenamento externo, onde são gravados os resultados da previsão, tem uma capacidade de armazenamento de 5 Tb, sendo necessário um espaço diário de cerca de 3,5 Gbytes.

Em termos operacionais são simulados 4 dias, uma vez que para minimizar os erros da modelação se inicia a previsão com a simulação do dia anterior (Dia-1), às 00 TUC, com base em dados meteorológicos de análise, permitindo um refinamento das condições iniciais para as simulações dos 3 dias seguintes: Dia+0 (previsão para o próprio dia), Dia+1 (para o dia seguinte) e Dia+2 (dois dias depois).

A operacionalização do sistema de previsão envolveu a criação de pequenos programas computacionais escritos em linguagem “shell script” e vulgarmente denominados de “scripts”. Estes programas são constituídos por uma lista de comandos que podem ser executados sem interação do utilizador, permitindo assim a operação automática dos vários processadores que constituem o sistema de modelos numéricos MM5-CHIMERE [Quigley, 2002]. A execução automática dos “scripts” é feita recorrendo ao comando UNIX “crontab”, que permite listar e escalonar os vários “scripts”, de forma a serem executados periódica e automaticamente.

Na Tabela 6.11 é apresentada a “crontab” criada para automatizar o sistema de previsão da qualidade do ar. As duas primeiras colunas dizem respeito às horas a que o “script” deverá ser executado (minutos hora), sendo indicado a seguir o local onde esse ficheiro executável se encontra guardado. As primeiras linhas referem-se ao “download” dos dados meteorológicos globais, a cada 6 horas. Veja-se o exemplo da primeira linha de instruções:

```
“30 07 * * * /home/FORECAST/crons/getavn 00 00”
```

relativo à execução do “script” “getavn 00 00”, todos os dias às 7h30, o qual permite fazer o “download” do ficheiro de dados meteorológicos globais respeitante às 00 UTC.

As instruções seguintes permitem executar os “scripts” de simulação do modelo meteorológico MM5, para o domínio europeu (mm5-EUR) e para o domínio de Portugal Continental (mm5-PT). O último conjunto de comandos diz respeito à simulação com o modelo de qualidade do ar CHIMERE, primeiro activando o “script” relativo à modelação química de escala continental (chimere-EUR) e, depois, à escala nacional (chimere-PT). Nos pontos seguintes descreve-se mais detalhadamente a funcionalidade de cada um destes ficheiros “script”.

Tabela 6.11. “Crontab” usada para automatização do sistema de previsão da qualidade do ar.

```

# NOT EDIT THIS FILE - edit the master and reinstall.
# (/tmp/crontab.4175 installed on Fri Jul 29 11:35:24 2005)
# (Cron version -- $Id: crontab.c,v 2.13 1994/01/17 03:20:37 vixie Exp $)
PATH=/sbin:/bin:/usr/sbin:/usr/bin:/opt/intel_fc_80/bin
PATH=/usr/local/GMT3.4.5/bin:$PATH
GMTHOME=/usr/local/GMT3.4.5/data

00 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 00 00
00 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 06 00
05 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 00
10 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 06
15 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 12
20 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 18
25 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 24
30 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 30
35 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 36
40 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 42
45 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 48
50 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 54
55 18 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 60
00 19 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 66
05 19 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 72
10 19 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 78
15 19 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 12 84
30 19 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/getavn4 18 00

# MM5 runs
00 20 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/mm5eur-fcst
30 20 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/mm5pt-fcst

# CHIMERE runs
00 00 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/chimere-AWM
30 03 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/chimere-P01
00 08 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/chimere-P01-posc-publico
15 08 * * * /home/dados2/alexandra/FORECAST/crons/create_html
~

```

### 6.3.2.1 Obtenção dos dados meteorológicos globais (script “getavn”)

As simulações do modelo meteorológico usam, como dados iniciais, os dados globais de previsão meteorológica, de 6 em 6 horas, do modelo AVN do NCEP [NCEP, URL19]. Estes dados são disponibilizados todos os dias a partir das 07 UTC e são obtidos através de um protocolo FTP, através do endereço: <ftp://ftpprd.ncep.noaa.gov/pub/data/nccf/com/gfs/prod/>.

### 6.3.2.2 Aplicação do modelo meteorológico MM5 à escala europeia (script “mm5-EUR”)

O processo de operacionalização do sistema de previsão inicia-se com a simulação do dia anterior (Dia-1) pelo modelo meteorológico MM5, realizada tendo como ponto de partida os dados de análise do modelo global AVN/NCEP até às 12 TUC do primeiro dia de simulação (Dia+0) e os dados de prognóstico do MM5 nas horas de simulação seguintes. A aplicação do modelo MM5 à escala continental fornece os dados meteorológicos de entrada necessários para o cálculo das variáveis meteorológicas usadas na simulação química do modelo CHIMERE a esta escala.

#### 6.3.2.3 Aplicação do modelo meteorológico MM5 à escala nacional (script “mm5-PT”)

O procedimento anterior é repetido para a escala do domínio mais pequeno, que abrange Portugal Continental. Esta simulação com o modelo MM5 visa estimar os dados meteorológicos de entrada necessários (os mesmos listados no ponto anterior) para a aplicação do modelo químico CHIMERE à escala nacional (Portugal Continental).

#### 6.3.2.4 Aplicação do modelo CHIMERE à escala europeia (script “chimere-EUR”)

O modelo fotoquímico é inicializado às 00 TUC do Dia-1, usando os dados das previsões para as 24 horas anteriores, sem considerar dados de monitorização, e efectua a integração para os 4 dias indicados. A simulação à escala europeia considera, como condições fronteira laterais e de topo, as concentrações médias mensais fornecidas pelo modelo químico climatológico MOZART (espécies gasosas) e pelo modelo GOCART (espécies aerossóis).

#### 6.3.2.5 Aplicação do modelo CHIMERE à escala nacional (script “chimere-PT”)

As condições fronteira consideradas no domínio de menor escala (Portugal Continental) são as concentrações obtidas nas simulações do domínio maior, incluindo ozono e seus precursores, continuando, no entanto, as condições na fronteira de topo a serem fornecidas pelos modelos MOZART e GOCART.

#### 6.3.2.6 Pós-processamento dos resultados (script “chimere-PT-posprocess”)

Existem dois scripts usados nesta fase de pós-processamento: *chimere-PT-posprocess* e *chimere-PT-posprocess-publico*. O primeiro é responsável pelo tratamento dos dados obtidos na simulação numérica, com vista ao cálculo das concentrações máximas (para o ozono) e das médias diárias (para as partículas) previstas para cada um dos dias simulados. O segundo permite calcular o IQA associado ao valor de concentração prevista para cada poluente, e um índice de qualidade do ar geral (que tem em conta os valores previstos para ambos os poluentes).

Estes valores (de concentração e IQA) são depois expressos e divulgados sob a forma de mapas. A criação desta informação espacial é feita recorrendo ao “software” “The Generic Mapping Tools” [GMT, URL20] desenvolvido para representação e visualização gráfica de informação geo-referenciada.

A Tabela 6.12 indica uma estimativa dos tempos de simulação de cada um dos módulos que compõem o sistema de previsão, mais precisamente: (i) a hora de início programada e (ii) a hora de fim prevista para a sua aplicação. A previsão operacional da qualidade do ar é iniciada às 18 horas do dia anterior e termina às 06h30 do primeiro dia de previsão (dia corrente, Dia+0), compreendendo

um total de cerca de 12 horas de cálculo numérico, efectuado maioritariamente durante a noite. Visando a diminuição do tempo total de cálculo numérico, realizam-se em simultâneo as duas aplicações do modelo meteorológico (domínio europeu e nacional). A aplicação do modelo CHIMERE aos dois domínios tem, no entanto, que decorrer separadamente dado que a simulação à escala regional (Portugal) usa os resultados da simulação à escala europeia como condições iniciais e fronteira. É de notar que a simulação da parte química (CHIMERE) consome uma parcela de tempo equivalente à da simulação meteorológica (MM5).

Tabela 6.12. Tempo estimado para a simulação de cada um dos processadores (modelos) que constituem o sistema de previsão.

<b>Módulo</b>	<b>Hora prevista de início da simulação</b>	<b>Hora prevista de fim da simulação</b>	<b>Tempo duração</b>
"Download" dados globais meteorológicos	18:00	20:00	2h
Aplicação do modelo MM5 para domínio europeu	20:00	23:00	3h
Aplicação do modelo MM5 para domínio de Portugal	20:30	23:30	3h
Aplicação do modelo CHIMERE ao domínio europeu	00:00	03:00	3h
Aplicação do modelo CHIMERE ao domínio Portugal	03:30	06:30	3h
<b>TOTAL tempo simulação</b>	<b>18:00</b>	<b>06:30</b>	<b>12h30</b>



## 6.4 Avaliação do sistema numérico de previsão

O desempenho do sistema de previsão foi avaliado por comparação com dados observados, quer ao nível do modelo meteorológico MM5, quer do modelo químico CHIMERE.

Apesar do modelo MM5 já ter sido validado em numerosas aplicações (Secção 3.2.1.3), torna-se aqui essencial avaliar a sua capacidade para realizar prognósticos com base em dados globais de previsão. Em termos de qualidade do ar, o exercício de avaliação focalizou-se no ozono e nas partículas inaláveis, compreendendo uma validação baseada na concordância entre o índice de qualidade do ar previsto e observado e numa análise estatística. Esta última incluiu a aplicação, para além dos parâmetros tradicionais, de indicadores definidos pela APA especificamente para a finalidade de previsão, estimados com base no número de alarmes (incumprimento dos valores limite) ocorridos e falsamente previstos.

O exercício de validação apresentado diz respeito ao período de 1 ano, compreendido entre Abril 2006 e Abril 2007, correspondente ao último período de teste do sistema de previsão.

### 6.4.1 Validação meteorológica

A validação do modelo meteorológico foi realizada por comparação directa entre os valores observados e previstos para as principais variáveis meteorológicas usadas como forçamento sinóptico para o modelo químico CHIMERE: (i) temperatura superficial (2 metros); (ii) velocidade e (iii) direcção do vento. Foram utilizadas todas as estações sinópticas, com dados válidos durante o período em análise, existentes na base de dados "National Climatic Data Center" (NCDC) da Organização Meteorológica Mundial (WMO) e localizadas na Figura 2.1b).

Na Figura 6.6 apresenta-se a comparação entre os valores observados e previstos pelo modelo MM5 nas várias estações, relativos à temperatura superficial, velocidade e direcção do vento, respectivamente. Esta análise é feita em termos dos parâmetros medianos, máximos e mínimos e dos percentis 25 e 75, relativamente ao primeiro dia de previsão (Dia+0). O modelo meteorológico revela um óptimo desempenho na previsão das 3 variáveis para as várias estações, quer em termos dos valores médios, quer dos extremos. A temperatura é o parâmetro previsto com maior exactidão, quer em termos médios, quer da variabilidade. A velocidade do vento é reproduzida com menor fidelidade nas estações localizadas na costa, como Aveiro e Sagres, existindo uma tendência geral para a subestimativa da variabilidade observada e das velocidades máximas do vento. A direcção do vento dominante (mediana) é bem prevista pelo modelo em todas as estações, apesar de alguns desvios na estação de Sagres.

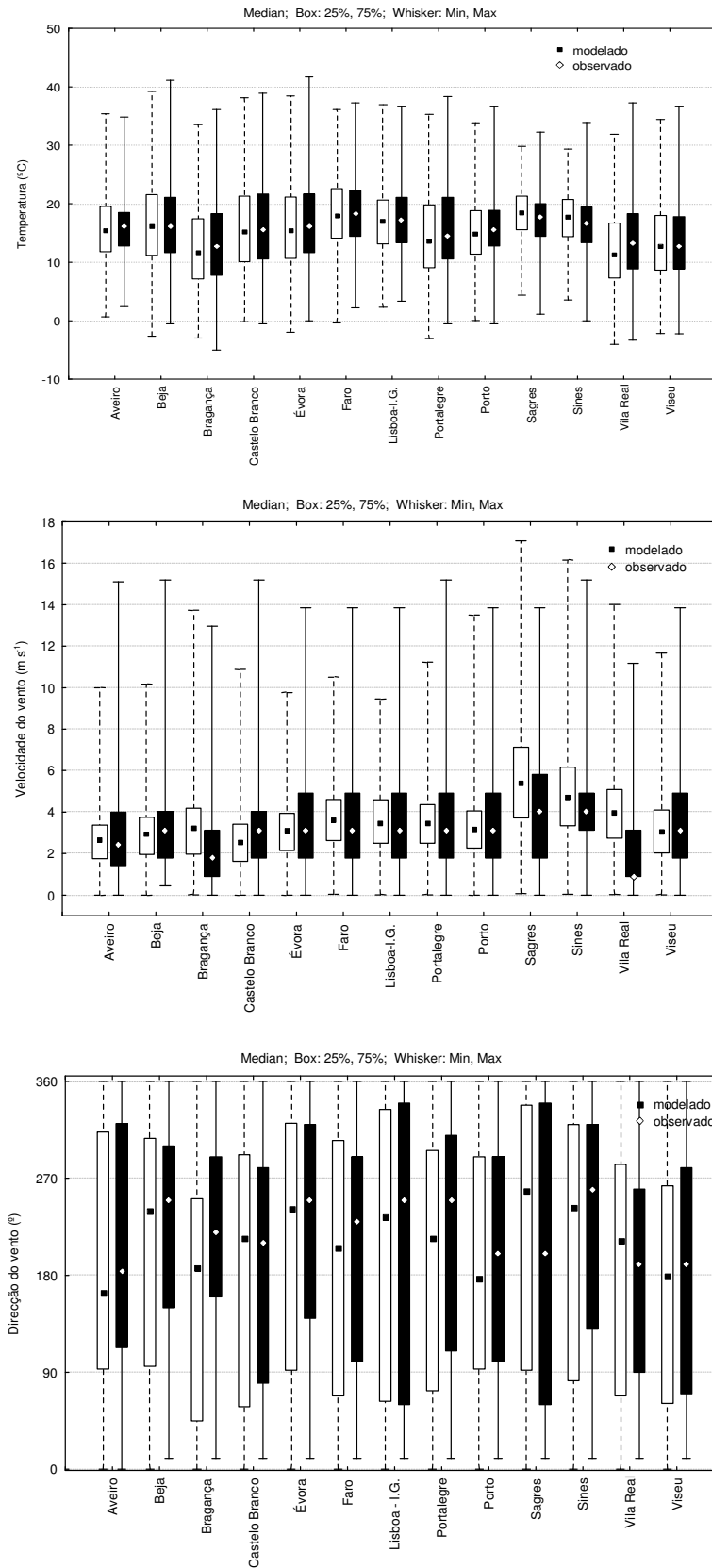


Figura 6.6. Comparação entre os valores observados e previstos pelo MM5 para a temperatura, velocidade e direcção do vento.

Nas tabelas seguintes listam-se os vários parâmetros estatísticos obtidos na comparação entre os valores observados e previstos para a temperatura superficial (Tabela 6.13), e as componentes zonal (Tabela 6.14) e meridional (Tabela 6.15) do vento, para cada uma das estações de monitorização e os 3 dias de previsão.

Tal como seria de esperar, o desempenho do modelo meteorológico é superior no primeiro dia de previsão (Dia+0) e inferior no 3º dia (Dia+2), para todas as estações e relativamente aos vários parâmetros calculados. Em termos quantitativos, a capacidade de previsão do modelo sofre uma redução média de 10%, entre o 1º e o 3º dia previstos.

Tabela 6.13. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da temperatura superficial, durante o período Abril 2006 – Abril 2007.

Temperatura Estação	Factor correlação (r)			BIAS (°C)			EQM (°C)		
	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Aveiro	0,91	0,90	0,90	-0,30	-0,35	-0,38	2,69	2,70	2,74
Beja	0,98	0,97	0,97	0,31	0,22	0,18	1,66	1,77	1,94
Bragança	0,97	0,97	0,96	0,91	0,93	0,94	2,03	2,10	2,26
Castelo Branco	0,98	0,98	0,97	0,41	0,41	0,33	1,53	1,64	1,84
Évora	0,98	0,97	0,97	0,49	0,44	0,38	1,81	1,93	2,06
Faro	0,95	0,95	0,94	-0,03	-0,15	-0,19	1,85	1,91	1,99
Lisboa IG	0,97	0,96	0,96	0,39	0,33	0,30	1,49	1,62	1,70
Portalegre	0,97	0,97	0,96	1,63	1,61	1,54	2,39	2,49	2,59
Porto	0,94	0,94	0,94	0,42	0,38	0,32	2,02	2,02	2,09
Sagres	0,91	0,90	0,89	-1,15	-1,22	-1,21	2,33	2,40	2,48
Sines	0,92	0,92	0,91	-1,13	-1,23	-1,23	2,17	2,26	2,34
Vila Real	0,96	0,96	0,95	0,24	0,27	0,24	2,83	2,90	3,04
Viseu	0,98	0,97	0,96	1,97	2,01	2,00	1,53	1,70	1,92
<b>Média</b>	<b>0,96</b>	<b>0,95</b>	<b>0,95</b>	<b>-0,32</b>	<b>-0,28</b>	<b>-0,25</b>	<b>2,02</b>	<b>2,11</b>	<b>2,23</b>

Tabela 6.14. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da componente zonal do vento (U), durante o período Abril 2006 – Abril 2007.

Componente U Estação	Factor correlação (r)			BIAS (ms <sup>-1</sup> )			EQM (ms <sup>-1</sup> )		
	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Aveiro	0,35	0,32	0,34	0,33	0,34	0,28	1,66	1,68	1,61
Beja	0,65	0,63	0,58	0,82	0,88	0,92	1,53	1,60	1,68
Bragança	0,50	0,46	0,39	0,26	0,28	0,30	1,76	1,79	2,02
Castelo Branco	0,66	0,63	0,54	0,64	0,64	0,73	1,40	1,45	1,61
Évora	0,62	0,60	0,54	0,96	0,97	1,03	1,78	1,82	1,92
Faro	0,65	0,61	0,55	0,89	0,89	0,90	1,87	1,94	2,06
Lisboa IG	0,55	0,53	0,46	0,15	0,14	0,06	1,45	1,47	1,51
Portalegre	0,64	0,60	0,55	0,23	0,27	0,30	1,29	1,39	1,48
Porto	0,40	0,39	0,36	1,49	1,49	1,48	2,20	2,21	2,22
Sagres	0,72	0,70	0,64	-1,20	-1,13	-1,14	1,90	1,95	2,04
Sines	0,65	0,62	0,59	0,12	0,17	0,20	1,49	1,58	1,64
Vila Real	0,48	0,48	0,39	0,41	0,43	0,48	2,44	2,43	2,62
Viseu	0,57	0,56	0,45	-1,65	-1,58	-1,54	1,34	1,38	1,56
<b>Média</b>	<b>0,57</b>	<b>0,55</b>	<b>0,49</b>	<b>-0,26</b>	<b>-0,29</b>	<b>-0,31</b>	<b>1,70</b>	<b>1,74</b>	<b>1,84</b>

Tabela 6.15. Análise estatística do desempenho do modelo MM5 na previsão da componente meridional do vento (V), durante o período Abril 2006 – Abril 2007.

Componente V Estação	Factor correlação (r)			BIAS (ms <sup>-1</sup> )			EQM (ms <sup>-1</sup> )		
	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Aveiro	0,70	0,68	0,63	-0,04	-0,04	-0,04	1,07	1,10	1,13
Beja	0,70	0,66	0,58	0,53	0,56	0,57	1,38	1,47	1,65
Bragança	0,61	0,59	0,48	-0,16	0,01	0,17	1,74	1,73	1,96
Castelo Branco	0,68	0,61	0,50	0,10	0,16	0,18	1,23	1,36	1,48
Évora	0,69	0,64	0,55	0,48	0,54	0,50	1,67	1,79	1,98
Faro	0,58	0,58	0,53	0,84	0,79	0,77	1,77	1,77	1,82
Lisboa IG	0,59	0,60	0,49	0,18	0,28	0,29	1,49	1,51	1,66
Portalegre	0,70	0,63	0,63	-0,46	-0,33	-0,18	1,51	1,60	1,55
Porto	0,72	0,68	0,60	-0,38	-0,38	-0,31	1,54	1,63	1,74
Sagres	0,71	0,68	0,60	-1,25	-1,39	-1,34	2,08	2,24	2,29
Sines	0,74	0,69	0,59	-0,53	-0,65	-0,58	1,76	1,92	2,08
Vila Real	0,66	0,60	0,52	0,73	0,81	0,84	1,64	1,80	1,94
Viseu	0,46	0,43	0,38	-0,68	-0,65	-0,56	1,81	1,80	1,81
<b>Média</b>	<b>0,66</b>	<b>0,62</b>	<b>0,54</b>	<b>0,05</b>	<b>0,02</b>	<b>-0,02</b>	<b>1,59</b>	<b>1,67</b>	<b>1,78</b>

Tal como constatado na análise gráfica, a temperatura é o parâmetro previsto com maior fidelidade, com factores de correlação superiores a 0,9 e erros absolutos médios de apenas 2°C. O valor positivo do BIAS para grande parte das estações sugere uma subestimativa da temperatura simulada, apesar de pouco significativa (< 1°C). Há, no entanto, um conjunto de estações (Aveiro, Faro, Sagres e Sines), situadas junto à costa, onde o modelo prevê valores de temperatura superiores às registadas, o que poderá dever-se a incorrecções, quer no uso do solo usado pelo modelo, quer na própria simulação da circulação de brisa marítima.

Relativamente às componentes do vento, conclui-se que a componente meridional V é estimada mais correctamente, com correlações superiores ( $r \approx 0,66$ ) e erros inferiores ( $EQM < 1,6 \text{ m s}^{-1}$ ). A componente U é ligeiramente subestimada ( $BIAS > 0$ ) na maioria das estações, sendo prevista com menor rigor em Aveiro, Porto e Vila Real. A maior facilidade em simular a componente meridional é explicada por esta ser mais bem definida e dominante na circulação sinóptica. Por outro lado, a simulação da componente zonal, predominante nas circulações térmicas de mesoscala que se desenvolvem junto à costa (brisa marítima) e no interior (brisas de montanha), exige uma resolução horizontal superior à usada nesta aplicação de escala regional ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ) [Monteiro *et al.*, 2002]. É de salientar o pior desempenho verificado, para as três variáveis meteorológicas, registado na estação de Vila Real, com velocidades de vento sobrestimadas e temperaturas subestimadas. A complexa orografia da área onde se encontra esta estação (> 500 m) poderá ser uma justificação para a dificuldade da sua simulação. Estes desvios na componente meteorológica podem indicar problemas de transporte e dispersão dos poluentes no modelo químico CHIMERE.

Para complementar esta interpretação dos resultados, foi feita a mesma análise estatística separadamente para o período de Verão e Inverno (Anexo VI). De um modo geral as temperaturas

prevista e observada correlacionam-se melhor durante o período de Verão, embora a magnitude dos desvios seja inferior no Inverno. As estações mais costeiras apresentam, no entanto, correlações da temperatura inferiores no Verão, indiciando maior dificuldade na simulação das circulações térmicas de brisa, mais intensas durante este período. Relativamente às componentes do vento, verifica-se uma melhor correlação da componente meridional no Inverno. Esta maior correlação explica-se pela componente sinóptica meridional (ventos do quadrante norte) ser mais bem definida no Inverno e a componente zonal mais explícita no Verão, devido às circulações de brisa e à componente sinóptica de leste. Os desvios absolutos são superiores, em ambas as componentes, no período de Inverno, que pode ser devido à maior intensidade do vento registada neste período.

A análise do perfil médio diário de temperatura previsto e observado, nas estações do Porto e Lisboa (Figura 6.7), permite realçar o bom desempenho do modelo MM5 à escala urbana e a sua capacidade em simular o efeito de ilha de calor que ocorre numa cidade, em especial durante a noite e no Verão [Arnfield, 2003].

Os desvios encontrados são ligeiramente maiores no período de Inverno: há uma subestimativa da temperatura em ambas as estações e durante todo o perfil diário, que poderá promover uma subestimativa da camada de mistura urbana no período de Inverno. Seria necessário, no entanto, uma validação da estrutura vertical da atmosfera para confirmar esta hipótese.

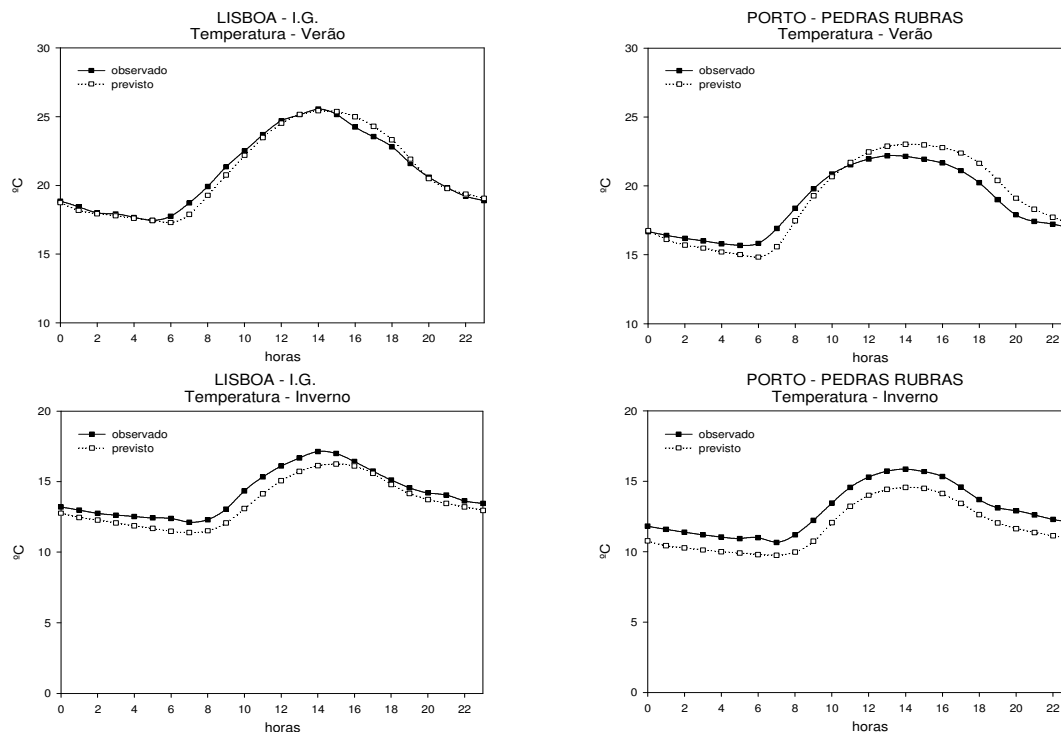


Figura 6.7. Comparação entre o perfil diário médio de temperatura observado e previsto para o período de Verão (Abril 06-Setembro 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07), para as estações de Lisboa e Porto.

A análise do perfil diário médio da velocidade do vento (Figura 6.8) permite concluir que existe uma clara sobrestimativa desta durante o período nocturno (mais notória no Verão) e uma oposta subestimativa durante o dia.

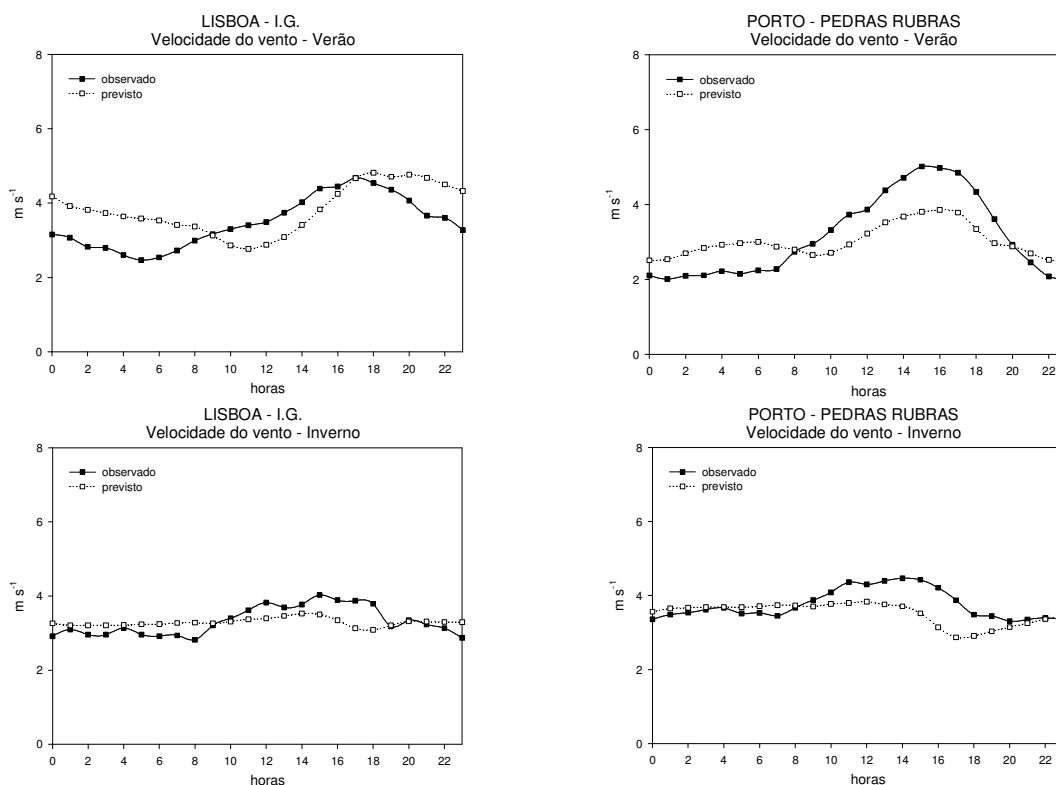


Figura 6.8. Comparação entre o perfil diário médio da velocidade do vento observado e previsto para o período de Verão (Abril 06-Sep. 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07), para as estações de Lisboa e Porto.

As incorrecções no período nocturno, juntamente com a tendência do modelo MM5 em sobrestimar a camada de mistura nocturna [Liu *et al.*, 2004], reflectem-se no padrão de dispersão dos poluentes, originando uma subestimativa da sua concentração durante a noite. Por outro lado, a subestimativa da velocidade do vento à superfície durante a tarde é responsável por plumas de poluentes menos extensas e diluídas que promovem a sobrestimativa dos picos de concentrações e/ou a sua incorrecta localização.

Idênticos resultados foram encontrados para a maioria das restantes estações, tal como apresentado no Anexo VI. Apesar da concordância entre os perfis observados e simulados, há a assinalar a constante subestimativa da velocidade do vento e sobrestimativa da temperatura durante o período da tarde, no Verão, revelando incorrecções na simulação das circulações térmicas de mesoscala (brisa marítima) que se desenvolvem primordialmente nesta altura do ano. Para além disso, é notória para a maioria das estações, mesmo suburbanas, a subestimativa da temperatura diária durante o período de Inverno.

## 6.4.2 Avaliação qualitativa - índice de qualidade do ar

### 6.4.2.1 Ozono

Apresenta-se na Figura 6.9 a taxa de sucesso do índice previsto, relativamente ao  $O_3$ , obtida pela comparação directa entre os IQA previstos pelo modelo e os observados nas estações que, durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro), tiveram uma eficiência de operação acima de 85%.

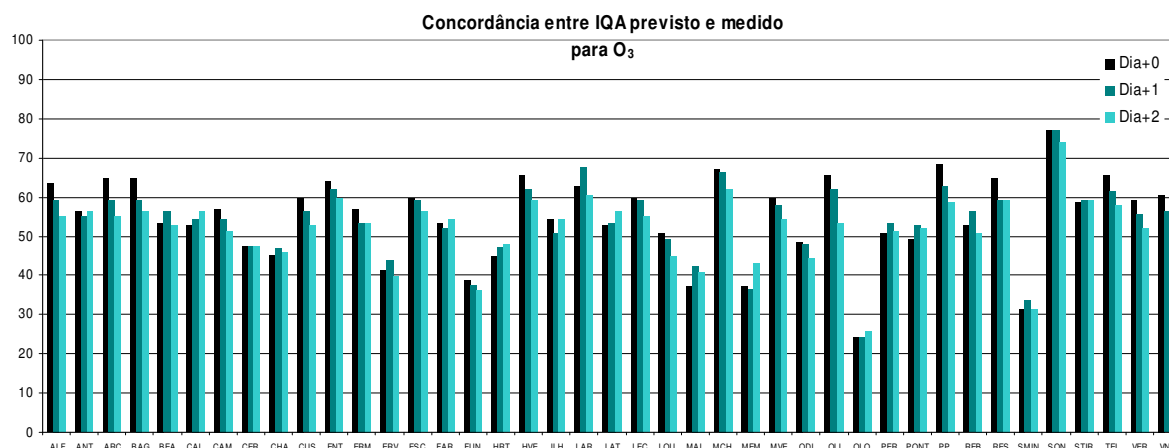


Figura 6.9. Concordância (%) entre o IQA simulado e o observado para  $O_3$ , para os 3 dias previstos, durante o período de Verão 2006 (Maio - Setembro).

De um modo geral, o desempenho do sistema de modelação na previsão do ozono é satisfatório, apresentando, em 50% das estações analisadas, uma taxa de sucesso do índice previsto igual ou superior a 60%. Há, no entanto, um conjunto de 5 estações que registam uma concordância inferior a 40%. Todas estas estações se localizam no interior Norte (FUN, OLO e SMIN) e Sul do país (MAL), ou seja, afastadas dos grandes centros urbanos, o que sugere a existência de dificuldades na simulação do transporte e da dispersão dos poluentes. Esta dificuldade poderá estar associada a incorrecções ao nível da simulação meteorológica, como atrás verificado na estação de Vila Real. Para além disso, poderá existir uma forte influência de emissões provenientes de Espanha, não contabilizadas no inventário de emissões do domínio de estudo. Estas hipóteses estão actualmente a ser avaliadas no âmbito de um projecto de investigação científica cujo objectivo é compreender a origem e formação das elevadas concentrações de  $O_3$  registadas no interior Norte do país (nomeadamente em Lamas de Olo e Senhora do Minho) [Evtyugina *et al.*, 2007]. Adicionalmente, a presença de emissões provenientes de incêndios florestais, ocorridos próximo de algumas das estações (por exemplo Fundão) e não contabilizadas no inventário de emissões, terá contribuído para uma incorrecta previsão dos níveis de  $O_3$ . A análise da Figura 6.9 permite ainda verificar que o desempenho do modelo é, geralmente, superior para o primeiro dia de previsão (Dia+0), diminuindo nos 2 dias seguintes, confirmando a importância da previsão meteorológica na qualidade do ar.

### 6.4.2.2 Partículas

À semelhança do efectuado para o ozono, apresenta-se, na Figura 6.10, a comparação entre os IQA previstos pelo modelo e os observados nas várias estações de monitorização de  $PM_{10}$  com funcionamento eficiente durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro).

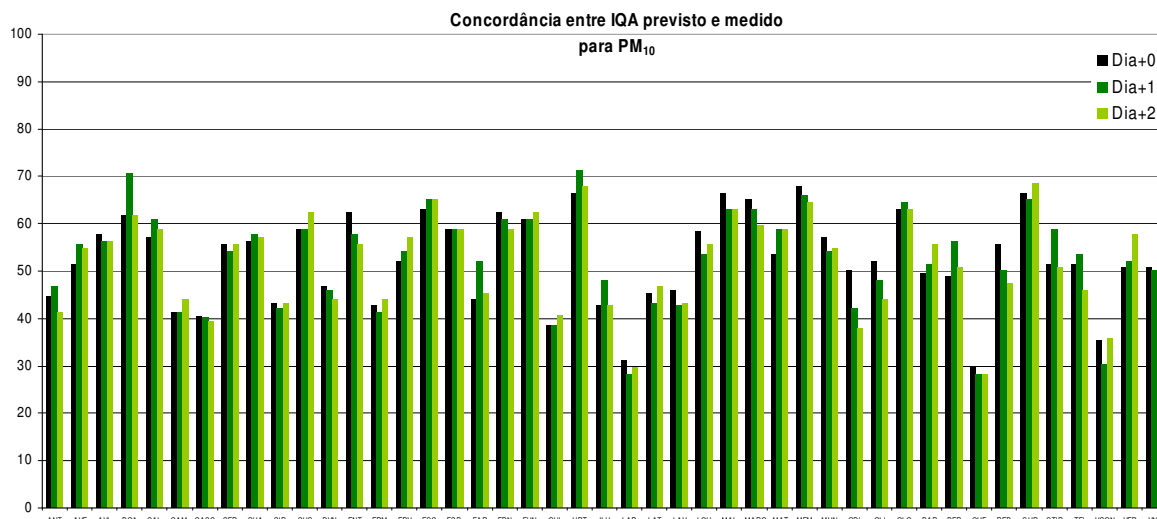


Figura 6.10. Concordância (%) entre o IQA simulado e o observado para  $PM_{10}$ , para os 3 dias previstos, durante o período de Verão 2006 (Maio-Setembro).

Verifica-se que esta concordância varia entre 40-70%, com excepção das estações do Laranjeiro, Quebedo e Vila do Conde. Todas estas estações se localizam em áreas urbanas (Área Metropolitana Sul de Lisboa e do Porto), sob influência conjunta de tráfego e indústria, cujas emissões não são traduzidas na grelha da simulação à escala regional ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ).

Ao contrário do  $O_3$ , não se observa uma tendência clara para que o primeiro dia de previsão seja o que apresenta melhores resultados. Dado que as concentrações de partículas, poluente primário, estão directamente relacionadas com os seus níveis de emissão, estes resultados mostram que uma previsão meteorológica mais correcta terá que estar aliada a uma correcta representatividade e variabilidade das emissões para se traduzir numa melhoria na simulação das concentrações.

Uma vez que as partículas inaláveis não registam valores críticos apenas no Verão [Pio *et al.*, 2007], foi também realizada idêntica comparação para o período de Inverno seguinte (Dezembro 2006 – Fevereiro 2007). A Figura 6.11 mostra a relação entre o desempenho do sistema de previsão nos dois períodos analisados, para diferentes tipos de estações.



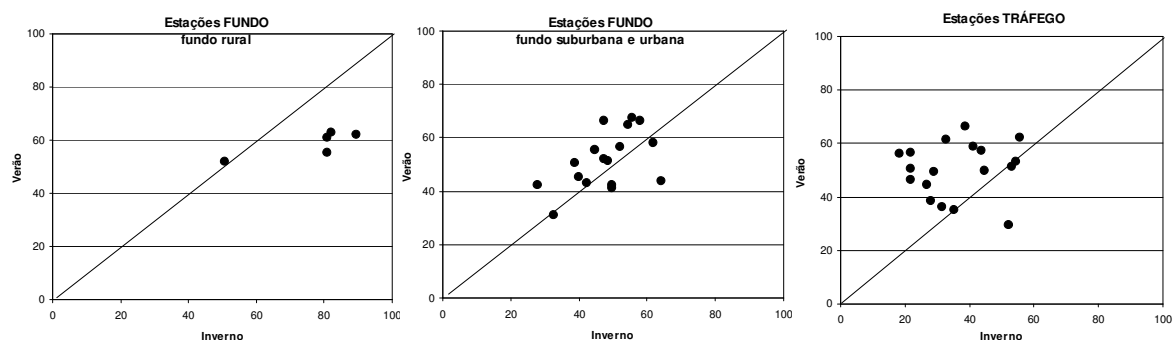


Figura 6.11. Comparação entre a concordância (%) do IQA para  $PM_{10}$  entre o período de Verão e Inverno, para o 1º dia de previsão (Dia+0), e para diferentes tipos de estações.

É notória a diferença de comportamento de acordo com o local monitorizado: as estações de carácter rural apresentam uma previsão mais deficiente durante o Verão, enquanto que as situadas em áreas urbanas são mais correctamente simuladas. No Verão, as emissões de  $PM_{10}$  resultantes de poeiras do Sahara são frequentes e governam os níveis deste poluente, especialmente em zonas rurais [Rodríguez *et al.*, 2004]. Dado que estas emissões não são contabilizadas no inventário, esta poderá ser uma possível razão para a diferença registada. Por outro lado, as referidas limitações do modelo meteorológico na previsão da temperatura no período de Inverno (Figura 6.7) podem também promover este pior desempenho do modelo químico nesta altura do ano, nas áreas citadinas.

Para uma melhor compreensão do comportamento de cada estação, foram analisadas as percentagens de concordância médias, por tipo de estação (Tabela 6.16) e por aglomeração (Tabela 6.17), ao longo dos 3 dias de previsão.

Tabela 6.16. Taxa média de sucesso do IQA previsto (%), por tipo de estação e para os 3 de previsão, para  $O_3$  (Verão 2006) e para  $PM_{10}$  (Abril 2006-Abril 2007).

Tipo estação		$O_3$			$PM_{10}$		
		Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Fundo	Rural	59,5	56,9	53,0	60,4	60,8	60,0
Fundo	Suburbana	55,8	53,7	53,3	55,2	57,6	56,2
Fundo	Urbana	58,3	55,2	53,2	52,8	51,3	50,2
Industrial	Urbana	58,5	56,8	53,1	52,3	52,9	51,6
Tráfego	Urbana	58,3	55,2	53,2	50,6	51,0	50,8

A análise por tipo de estação (fundo rural/suburbano/urbano; industrial e tráfego) permite comprovar que são as estações de fundo que apresentam um maior índice de concordância (60% em média), explicado pela maior representatividade destas estações na resolução de grelha ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ) usada na simulação numérica.

É de salientar, no entanto, que as diferenças encontradas, para os vários tipos de estações, são bastante mais notórias no caso das partículas. Para estas, a taxa de sucesso da previsão desce para cerca de 50% nas estações de tráfego. Estes piores resultados são justificados por fenómenos de origem local (tais como emissões associadas a veículos) sem possibilidade de expressão e detalhe na actual grelha de simulação, e com consequências directas na simulação dos poluentes primários como as  $PM_{10}$ .

Por sua vez, a análise por aglomeração (Tabela 6.17) permite concluir que, para o caso das partículas, e apesar do tipo de estação, a previsão foi realizada com maior fiabilidade nas aglomerações que não compõem os dois grandes centros urbanos de Lisboa e Porto. É nas zonas mais remotas (e mais especificamente nas aglomerações do interior do país) que se encontram as estações de carácter de fundo rural, o que comprova a análise anteriormente feita por tipo de estação. Esta situação é inversa na análise do  $O_3$ , para o qual a concordância do IQA aumenta nas áreas metropolitanas. Isto reflecte o já referido sobre o desempenho do modelo abaixo da média prevista nas estações do interior do país (nomeadamente Lamas de Olo e Senhora do Minho). Tal como já referido, a ausência de um potencial transporte e formação de ozono devido a emissões de Espanha aliado a algumas deficiências na previsão meteorológica, podem explicar estas diferenças.

Relativamente às duas áreas metropolitanas, não se registam diferenças significativas no desempenho do modelo para  $PM_{10}$ . A percentagem de concordância para o  $O_3$  é, no entanto, ligeiramente superior nas aglomerações de Lisboa (AML Norte e Sul).

Tabela 6.17. Taxa média de sucesso do IQA previsto (%), por aglomeração e para os 3 dias previstos, durante o Verão 2006 (para  $O_3$ ) e o período Abril 2006-Abril 2007 (para  $PM_{10}$ ).

Aglomeração	$O_3$			$PM_{10}$		
	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Vale do Ave; Porto Litoral; Braga; Vale do Sousa	53,2	52,1	51,2	52,2	50,7	49,9
AML Norte e Sul	57,6	55,8	52,2	52,5	54,2	54,1
Algarve	45,8	49,1	48,9	54,9	54,9	53,6
Restantes (interior país)	49,7	48,98	47,5	59,1	60,3	60,8

### 6.4.3 Avaliação qualitativa (séries temporais)

#### 6.4.3.1 Ozono

A Figura 6.12 apresenta a comparação temporal entre as concentrações máximas diárias de  $O_3$  observadas e previstas durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro), para diferentes tipos de estações (fundo, tráfego e industrial) e localizações (Norte, Centro e Sul de Portugal).

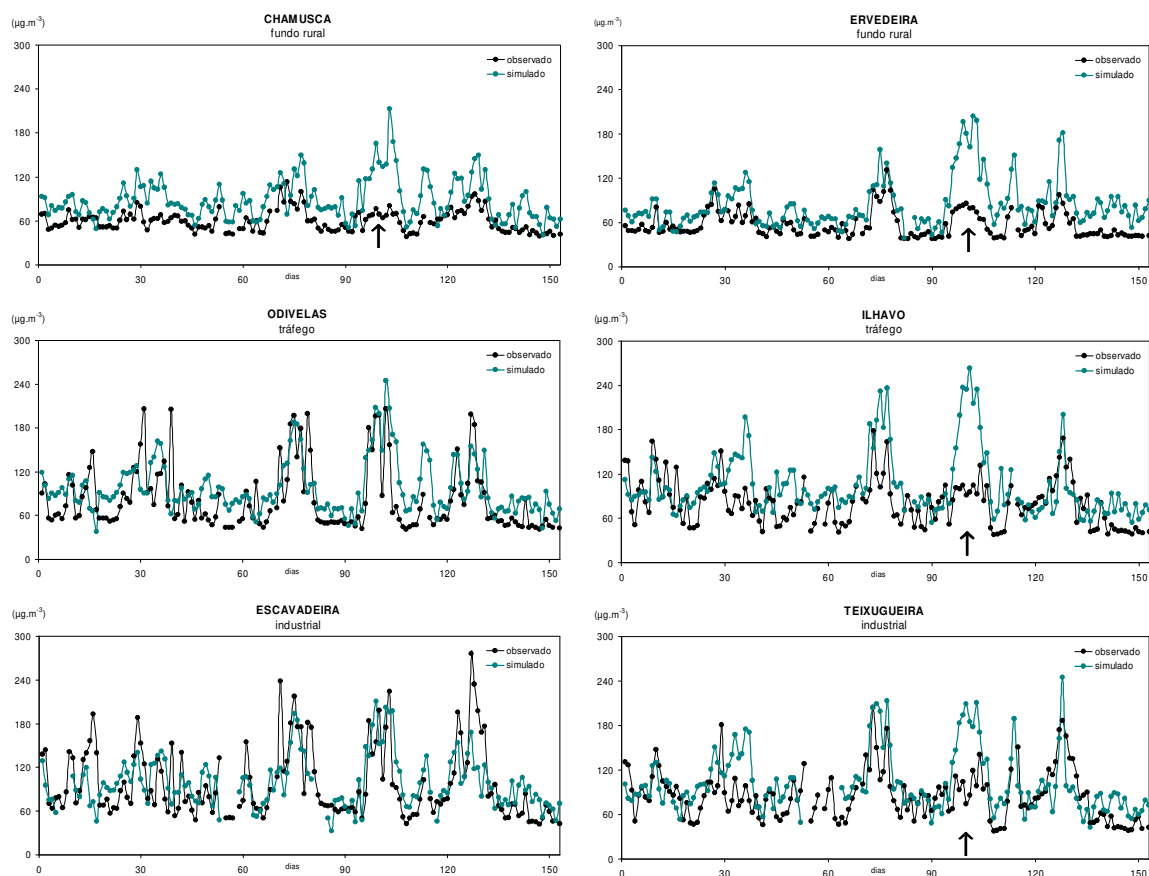


Figura 6.12. Comparação entre as concentrações máximas diárias de  $O_3$  observadas e simuladas pelo modelo em diferentes estações, durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro).

O modelo conseguiu prever a maioria dos picos de concentração observados nas várias estações, apesar de uma relativa sobrestimativa (30%), sobretudo nas estações de fundo (Chamusca e Ervedeira). É, contudo, nestas estações que a variação diária dos máximos de ozono é prevista mais correctamente, justificada pela sua maior representatividade face à malha de simulação. Esta variação temporal é particularmente difícil de prever no caso das estações industriais (Escavadeira e Teixugueira), devido ao carácter específico e variável das emissões de pequenas e grandes indústrias, não traduzido no inventário de emissões.

São de salientar os vários episódios simulados, em todas as estações, durante a primeira quinzena de Agosto (assinalada a preto), mas só registados na estação de Odivelas e Escavadeira. Este período pautou-se por condições meteorológicas favoráveis à formação de  $O_3$  (elevadas temperaturas e vento fraco). No entanto, a grande ocorrência de incêndios florestais neste período, em especial no interior centro, norte e sudeste do país [DGRF, URL21], provocou um acréscimo de aerossóis na atmosfera, aumentando o albedo e diminuindo a taxa de fotólise real, tal como referido no Capítulo 5. Dado que nem as emissões dos incêndios, nem as respectivas alterações das propriedades radiativas da atmosfera são tidas em conta no sistema de previsão, esta poderá ser uma explicação para a discrepância encontrada entre o previsto e o observado durante este período em determinadas estações.

Esta influência foi confirmada no exercício de validação excluindo os dias em que ocorreram incêndios florestais. A comparação entre os resultados iniciais e os obtidos quando são excluídos estes dias revelou uma melhoria significativa do desempenho do sistema de previsão.

Na Figura 6.13 é ilustrada esta comparação através da razão dos parâmetros estatísticos ( $r$ , EQM e BIAS) obtidos nas 2 validações, para as mesmas estações da Figura 6.12. A melhoria referida é traduzida pelo aumento do factor de correlação e pela diminuição dos desvios absolutos e sistemáticos quando é retirado da análise os dias com ocorrências de fogos. Apesar desta se verificar em todas as estações (com excepção de Escavadeira), é mais notória na estação de Ílhavo e Teixugueira, ambas com previsões incorrectas de picos de ozono (Figura 6.12).

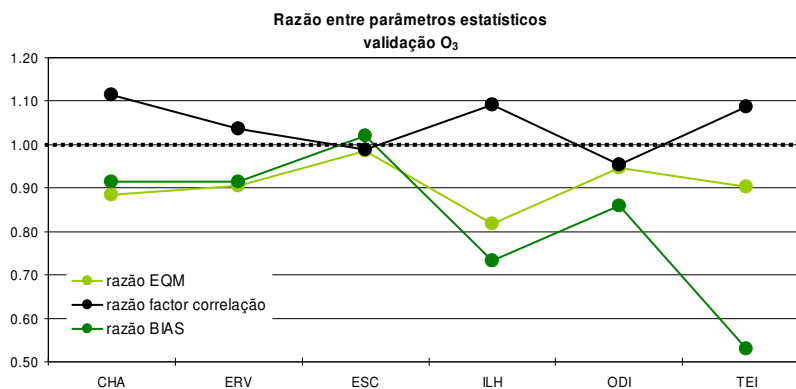


Figura 6.13. Razão entre os parâmetros estatísticos obtidos na validação do  $O_3$  excluindo e considerando os dias em que ocorreram incêndios florestais.

### 6.4.3.2 Partículas

Tal como para o ozono, a Figura 6.14 apresenta a comparação temporal entre as concentrações médias diárias de  $PM_{10}$  observadas e simuladas durante o período de Verão de 2006 (Maio a Setembro), para diferentes tipo de estações (fundo, tráfego e industrial) situadas em diferentes aglomerações (Vale do Tejo e Oeste; Braga; Porto Litoral e Norte Interior).

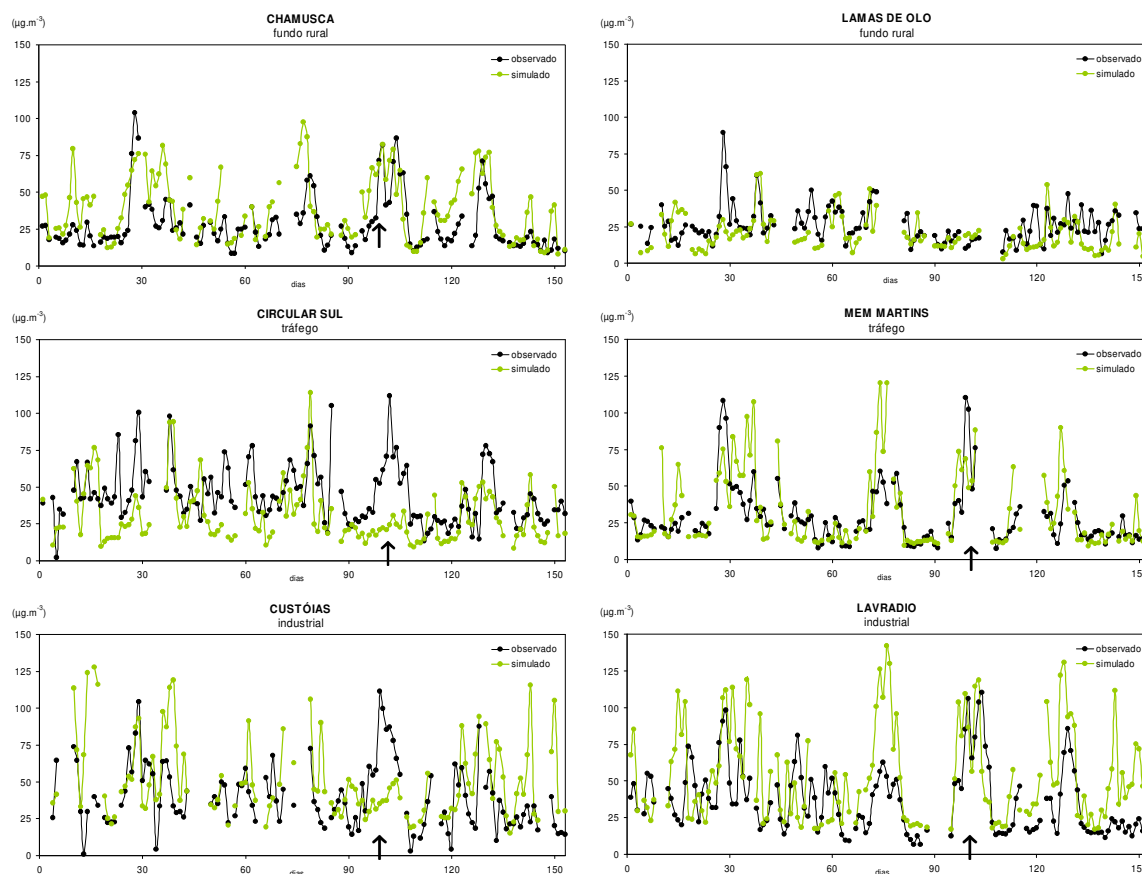


Figura 6.14. Comparação entre as concentrações médias diárias de  $PM_{10}$  observadas e simuladas em várias estações, durante o período de Verão de 2006 (Maio-Setembro).

O sistema de modelos foi capaz de prever, com relativa exactidão, a variabilidade e a magnitude dos níveis médios de partículas registados durante o período de Verão analisado. Este facto é mais notório no caso das estações de fundo (Chamusca e Lamas de Olo) e menos nas de carácter industrial, justificado pelos factores atrás apresentados na análise do ozono.

Existem vários episódios de  $PM_{10}$ , ocorridos em simultâneo em várias estações (com excepção da estação de fundo Lamas de Olo), correctamente previstos pelo modelo. Um dos períodos episódicos, já identificado para o  $O_3$  e registado na primeira quinzena de Agosto (assinalado a preto) não foi, contudo, reproduzido pelo sistema de modelação nas estações situadas no litoral Norte (Circular Sul e Custóias). A já referida ocorrência de incêndios florestais durante este período é uma hipótese a

apontar. Para além disso, o índice de aerossol dado pelo “TOMS-Total Ozone Mapping Spectrometer” [TOMS, URL22] indica que estes episódios poderão ter também origem em eventos naturais, mais propriamente no transporte de poeiras do Sahara, não possíveis de prever pelo sistema de modelação.

A mesma avaliação, feita para o período de Inverno (Janeiro-Março 2007), é ilustrada na Figura 6.15. Observaram-se concentrações médias diárias de partículas inferiores às observadas no Verão, principalmente nas estações de fundo. A variabilidade e a magnitude dos valores médios continuam a ser correctamente previstas pelo modelo no caso das estações de fundo, e mais deficientemente nas estações industriais. A grande variabilidade dos valores médios de  $PM_{10}$ , observados nestas últimas estações, reflecte a flutuação do padrão de emissões existente nestas áreas industriais, a qual não é traduzida no inventário usado na previsão numérica. Em termos episódicos, os picos de  $PM_{10}$  ocorridos, nas estações de tráfego e industriais, durante os primeiros 10 dias de 2007 (assinalados a preto), foram previstos pelo modelo. Neste caso, foram as condições meteorológicas pouco favoráveis à dispersão de poluentes que estiveram na origem dos valores elevados de partículas.

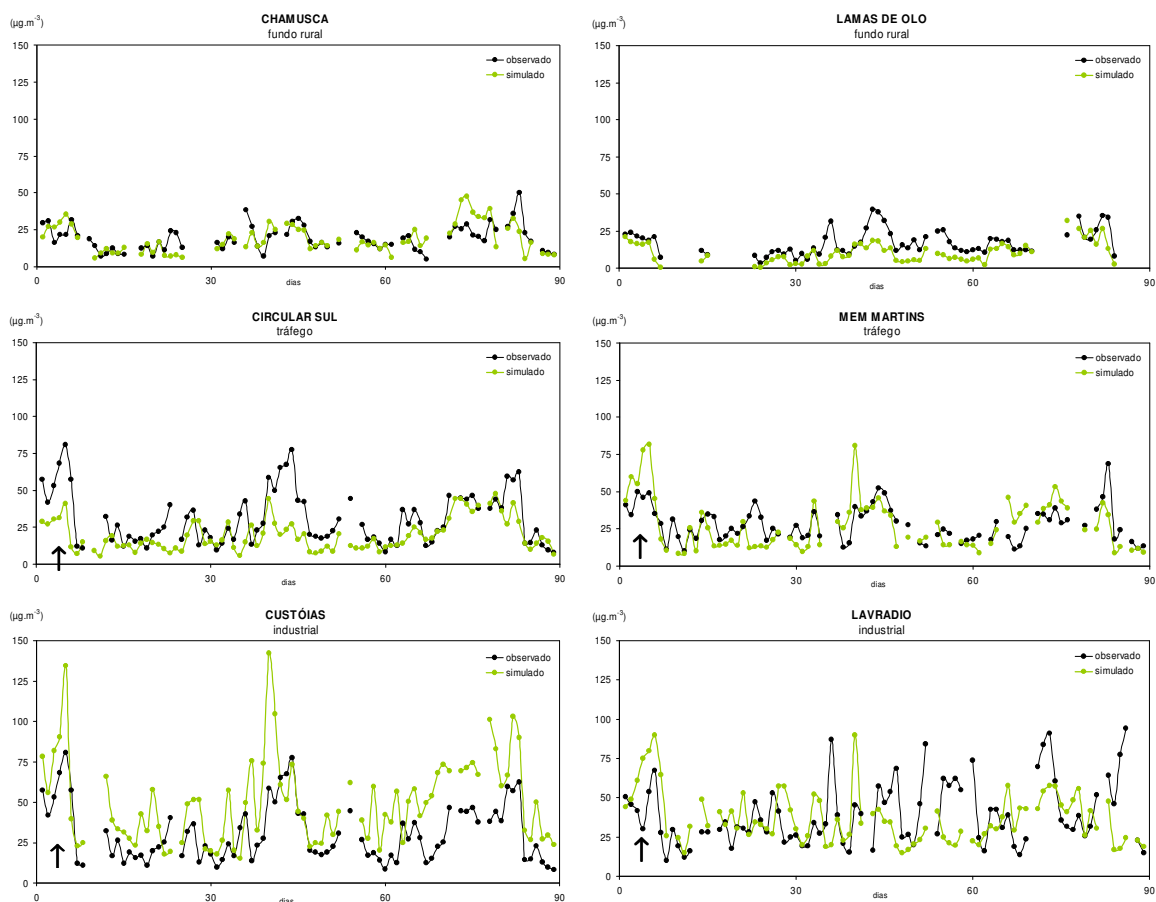


Figura 6.15. Comparação entre as concentrações médias diárias de  $PM_{10}$  observadas e simuladas em várias estações, durante o período de Inverno de 2007 (Janeiro-Março).

#### 6.4.4 Avaliação quantitativa - validação estatística

De acordo com a análise estatística realizada para a simulação de longo prazo, foram aplicados os mesmos parâmetros estatísticos para a avaliação quantitativa do desempenho do sistema de modelos na previsão operacional, nomeadamente o factor de correlação ( $r$ ), o erro quadrático médio (EQM) e o erro sistemático médio (BIAS).

##### 6.4.4.1 Ozono

Na Figura 6.16 avalia-se o desempenho estatístico em cada uma das estações de fundo (rural e suburbano) de monitorização de  $O_3$  com funcionamento eficiente durante o período de Verão 2006.

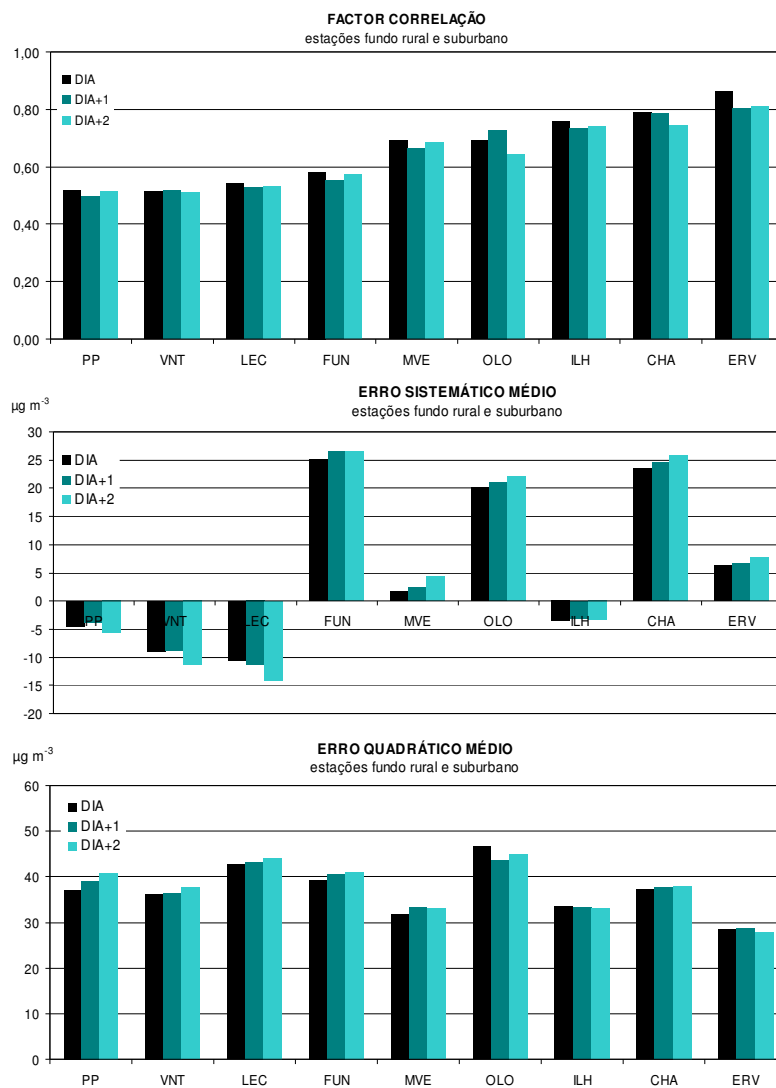


Figura 6.16. Parâmetros estatísticos para as estações de fundo rural e suburbano que monitorizaram  $O_3$  durante o Verão de 2006.

A correlação encontrada nas várias estações é elevada ( $0,5 < r < 0,85$ ), sendo superior a 0,6 para a maioria. É de salientar que apesar dos desvios entre as concentrações máximas observadas e previstas na estação de Lamas de Olo (já verificado na análise qualitativa), o factor de correlação é elevado ( $> 0,65$ ), o que revela um satisfatório desempenho do modelo na simulação do padrão de dispersão e transporte dos poluentes, sustentando a hipótese de incorrecções ao nível do valor das emissões.

Relativamente à análise do erro sistemático, existe uma significativa subestimativa dos picos de  $O_3$  nas estações do interior Norte e Centro (Fundão, Lamas de Olo, e Chamusca) e uma sobrestimativa, de menor importância, nas estações do litoral (Leça e Vila Nova da Telha). A quantificação dos erros absolutos (EQM) acompanha esta análise sistemática, revelando desvios mais elevados para as estações com BIAS mais positivos (OLO, FUN e CHA) e mais negativos (LEC e VNT).

Um dos importantes objectivos deste modelo de prognóstico é a sua capacidade de prever correctamente as concentrações máximas de  $O_3$ , em particular, os valores superiores aos limites legislados ( $180 \mu g m^{-3}$  e  $240 \mu g m^{-3}$ ), cuja ultrapassagem implica que uma informação/alerta de má qualidade do ar seja fornecida ao público, de forma a serem estabelecidos planos de protecção dos grupos mais vulneráveis à poluição atmosférica, bem como medidas de mitigação de emissões em tempo real. A Tabela 6.18 resume o desempenho do modelo na previsão das ultrapassagens aos referidos limites legislativos, utilizando os indicadores definidos pela EEA [1997]. É de referir que nesta análise apenas foram consideradas as estações de monitorização de fundo (onde se registam geralmente as maiores concentrações de  $O_3$ ), tendo sido excluídos os dias com incêndios florestais.

Tabela 6.18. Probabilidade de detecção e falsos alarmes ao limiar de informação ( $180 \mu g m^{-3}$ ) e ao valor alvo para a protecção da saúde humana ( $120 \mu g m^{-3}$ ).

Poluente $O_3$	Limiar informação			Valor alvo		
	Máximos diários $> 180 \mu g m^{-3}$			Médias octo-horárias $> 120 \mu g m^{-3}$		
(%)	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Probabilidade de detecção	55	50	38	65	55	49
Falsos alarmes	54	58	69	19	25	29

O desempenho do modelo, na previsão destas excedências, varia significativamente ao longo dos dias simulados/previstos. O primeiro dia de previsão (Dia+0) é satisfatoriamente simulado, apresentando, contudo, uma percentagem elevada de falsos alarmes para o limiar de informação. As excedências às médias octo-horárias (referentes ao valor alvo de protecção da saúde humana) são previstas com maior sucesso (50 - 70%) relativamente às ultrapassagens do limiar de informação ao público (35 - 60%). Tal facto é devido, em parte, ao valor mais ponderado da média móvel octo-horária em comparação com a média horária.



## 6.4.4.2 Partículas

À semelhança do realizado para o  $O_3$ , apresentam-se na Figura 6.17 os mesmos indicadores estatísticos para cada uma das estações de fundo em funcionamento eficiente no Verão de 2006 e Inverno 2007.

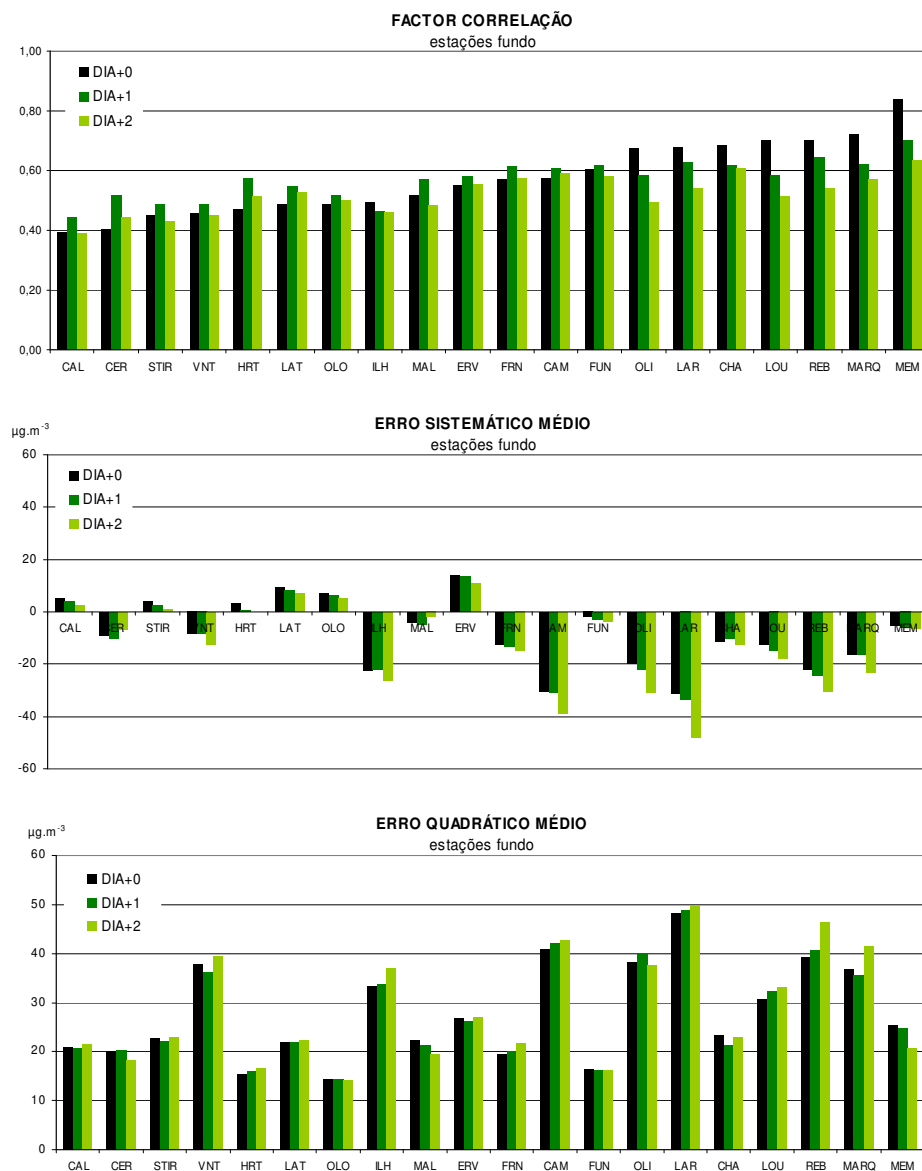


Figura 6.17. Parâmetros estatísticos calculados para as estações de fundo de  $PM_{10}$ , para os três dias de previsão, durante o Verão de 2006 (Junho-Setembro).

Verifica-se que não existe uma relação directa entre factores de correlação altos e desvios/erros baixos. Veja-se o caso das estações de fundo da aglomeração AML Norte, que apresentam correlações relativamente altas mas erros (EQM e BIAS) médios também elevados.

De uma forma geral, é nas estações de fundo localizadas nos centros urbanos de Porto e Lisboa que se observam erros quadráticos médios mais elevados. Relativamente ao BIAS, a existência de algumas estações com valores positivos (nomeadamente no interior Norte do país) indicia algumas incorrecções ao nível da espacialização das emissões de partículas.

Tal como para o ozono, um dos objectivos fundamentais deste sistema de previsão é detectar com sucesso a ocorrência de episódios de partículas. Assim sendo, foi analisada a capacidade do modelo em prever as excedências das concentrações de  $PM_{10}$  ao valor limite diário estabelecido para a protecção da saúde humana ( $50 \mu g m^{-3}$ ). A Tabela 6.19 resume os resultados encontrados, para o período de Verão e de Inverno, separadamente.

Tabela 6.19. Taxas de alarmes detectados e falsos alarmes ao valor limite diário de  $PM_{10}$  para a protecção da saúde humana ( $50 \mu g m^{-3}$ ), para o período de Verão e Inverno.

Poluente $PM_{10}$	Verão 2006			Inverno 2007		
	Médias diárias $> 50 \mu g m^{-3}$			Médias diárias $> 50 \mu g m^{-3}$		
(%)	Dia+0	Dia+1	Dia+2	Dia+0	Dia+1	Dia+2
Probabilidade de detecção	55	52	49	52	49	45
Taxa de falso alarme	38	38	42	43	42	44

Esta probabilidade de detecção é da mesma ordem de grandeza da verificada para o ozono ( $> 50\%$ ), verificando-se novamente uma maior taxa de sucesso para o primeiro dia de previsão (Dia+0) e uma relativamente elevada percentagem de falsos alarmes simulados ( $\approx 40\%$ ).

As diferenças registadas entre os dois períodos analisados não têm uma expressão relevante, sendo a probabilidade de detecção ligeiramente maior no Verão e a taxa de alarmes falsos mais elevada durante o período de Inverno.

## 6.5 Divulgação da previsão e gestão da qualidade do ar

O sucesso de um programa de previsão da qualidade do ar depende não só da precisão do método de previsão, mas também da sua divulgação ao público-alvo desse programa. Esta disseminação pode ser realizada via Internet, para além de outros órgãos de comunicação social (televisão, rádio e imprensa) de modo a fornecer alertas em tempo real à população e reduzir o tempo de exposição à poluição atmosférica.

A divulgação da qualidade do ar prevista implica, por outro lado, estratégias de gestão, tais como planos de acção de curto prazo para evitar que as esperadas elevadas concentrações se verifiquem ou, caso estas sejam inevitáveis, elaborar medidas para protecção da saúde humana nas áreas mais críticas.

De seguida descreve-se, em detalhe, a página de Internet desenvolvida e apresentam-se linhas orientadoras para uma futura estratégia de gestão da qualidade do ar com base na sua previsão.

### 6.5.1 Criação da página web

Sendo a Internet, actualmente, um dos meios mais utilizados e eficazes para a disseminação de um produto, foi realizado um trabalho de pós-processamento dos resultados obtidos na previsão da qualidade do ar, de modo a estes serem apresentados numa página de Internet. O objectivo desta página é disponibilizar, a todo o público, a consulta do índice de qualidade do ar previsto para os próximos três dias, ou a pesquisa, inclusivé, de previsões passadas, para além de disponibilizar alguma informação adicional sobre o método de previsão. Esta página foi desenvolvida, recorrendo às linguagens de programação “Html” e “Javascript”, no domínio do grupo de investigação GEMAC-UA ([www.dao.ua.pt/gemac](http://www.dao.ua.pt/gemac)).

A sua estrutura (Figura 6.18) facilita o acesso e a visualização imediata do índice de qualidade do ar global (tendo em conta o ozono e as partículas) previsto para o dia presente e os dois dias seguintes. As concentrações dos poluentes obtidas por simulação numérica são apresentadas sob a forma de 5 cores, de acordo com as classes do índice de qualidade do ar (ver Tabela 6.10), facilitando a percepção e compreensão por parte do público e permitindo identificar de imediato quais as regiões mais críticas em termos de qualidade do ar. Para além disso, a página principal possibilita ainda aceder aos restantes menus e sub-menus de opções que a compõem, entre eles:

- **Menu “Detalhes”:** permite aceder à previsão do índice de qualidade do ar para cada poluente ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ) e consultar o histórico das concentrações previstas. É possível ainda aceder aos resultados para o domínio Europeu através da opção “Previsão para a Europa”.

- **Menu “Informações”:** dispõe de informações sobre o índice de qualidade do ar, eventos naturais e efeitos na saúde.
- **Menu “Projecto”:** reúne toda a informação relativa ao trabalho desenvolvido, nomeadamente, os objectivos, a descrição do sistema de modelos e sua validação, para além das publicações realizadas no âmbito deste trabalho.

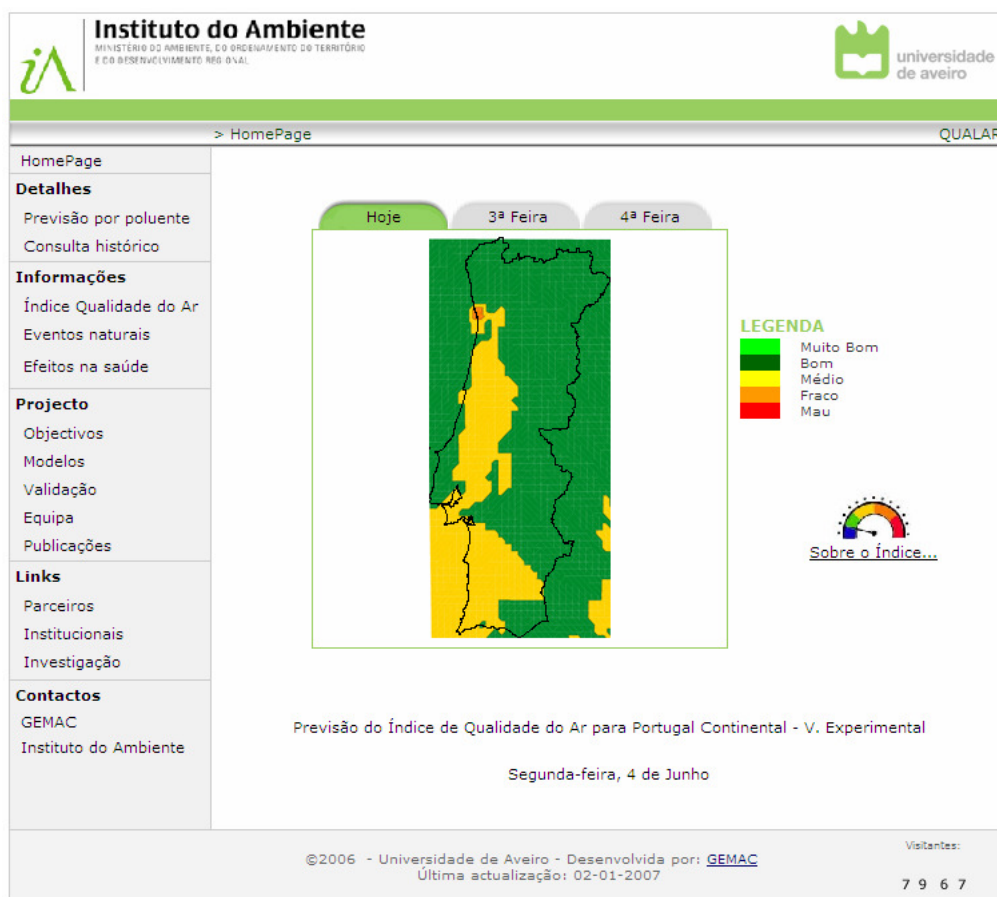


Figura 6.18. Página principal de acesso à previsão da qualidade do ar ([www.dao.ua.pt/gemac/previsao\\_qar](http://www.dao.ua.pt/gemac/previsao_qar)).

Na Figura 6.19 é apresentada, a título de exemplo, a previsão do índice de qualidade do ar para cada poluente individual ( $O_3$  e  $PM_{10}$ ), para o mesmo dia 4 de Julho de 2007 da Figura 6.18. Esta pode ser visualizada quando seleccionado o menu “Detalhes”.

Trata-se de um tipo de informação importante e decisiva, caso este serviço de previsão seja usado para planos de acção de curto-prazo, uma vez que será necessário identificar o poluente responsável pela má qualidade do ar prevista para estabelecer medidas apropriadas de redução das emissões desse poluente.

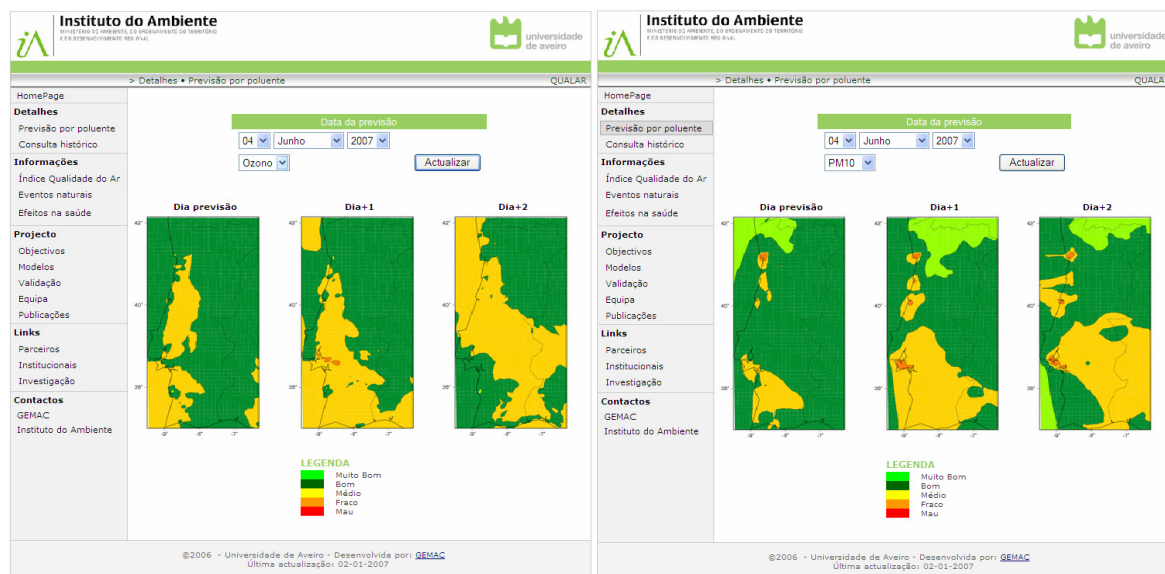


Figura 6.19. Página de internet de acesso à informação sobre o índice de qualidade do ar previsto para o  $O_3$  e  $PM_{10}$  ([www.dao.ua.pt/gemac/previsao\\_gar/prev.html](http://www.dao.ua.pt/gemac/previsao_gar/prev.html)).

Em termos futuros, pretende-se que esta página incorpore ainda a visualização da evolução temporal das concentrações previstas para locais específicos considerados como mais críticos e uma possível comparação com valores observados, caso existam estações de monitorização nesses locais.

No sentido de divulgar este serviço pelos órgãos de comunicação social e pela população em geral, foi seleccionado um conjunto de cidades cuja previsão da qualidade do ar será difundida pelos jornais, rádio e televisão. As previsões são divulgadas para as capitais de distrito coincidentes com a existência de aglomerações (Secção 2.2.1) e que dispõem de monitorização em contínuo de qualidade do ar, para posterior validação da previsão. Seguindo estes critérios, foram escolhidas 6 capitais de distrito: Porto; Aveiro; Coimbra; Lisboa; Setúbal e Faro. Este serviço será divulgado, sob a responsabilidade da APA, sendo disponibilizado diariamente por volta das 18 horas, pelos seguintes meios:

- por e-mail para uma “mailing-list” dos responsáveis pela divulgação desta informação (jornais, rádios, etc.), da APA, das CCDRs e de todas as entidades interessadas.
- numa página de Internet exclusiva para a imprensa, onde é fornecido, para cada cidade/aglomeração, o índice de qualidade do ar global resultante do pior nível previsto entre dois poluentes e o poluente responsável pela cor do índice (ozono ou partículas).

### 6.5.2 Gestão da qualidade do ar com base na previsão

A definição de planos de curto prazo para evitar que as elevadas concentrações previstas se verifiquem ou, caso sejam inevitáveis, para preparar medidas visando a protecção da saúde humana nessas áreas é uma preocupação inerente a este trabalho de previsão da qualidade do ar.

O estabelecimento de medidas com vista a serem atingidos os valores limite de concentração dos vários poluentes, em particular os limites com base horária e diária, não deve ser um acto isolado, sendo determinante para o sucesso da sua aplicação a integração com medidas já definidas. Efectivamente, encontra-se já estabelecido um conjunto de medidas que, no âmbito de outras estratégias, influenciam a qualidade do ar e, consequentemente, contribuem para o cumprimento dos valores limite estipulados.

No contexto das actuais políticas, os instrumentos que estão a ser desenvolvidos incluem planos e programas (PP) multi-poluentes/multi-efeitos, com reflexos na diminuição das emissões dos poluentes cujas concentrações no ar ambiente excedam os valores limite legislados. Para além destes, destacam-se o Plano Nacional para as Alterações Climáticas (PNAC), o Programa para os Tectos de Emissão Nacional (PTEN) e a Prevenção e Controlo Integrados de Poluição (PCIP) [Borrego *et al.*, 2006b].

As autarquias detêm um papel importante na implementação de políticas e medidas, bem como na sensibilização da população e das pequenas e médias empresas, na medida em que são órgãos de poder mais próximos daquelas e que, à escala local, podem produzir alterações significativas. Neste contexto, os planos desenvolvidos no âmbito de iniciativas ligadas às Agendas 21 Locais e Planos Municipais de Ambiente (PMA) são instrumentos importantes a ter em conta na gestão da qualidade do ar ao nível local e concelhio.

Quando se prevê que estas políticas e instrumentos em implementação não são suficientes para o cumprimento dos VL, torna-se necessário aplicar medidas adicionais, de acordo com os poluentes e tipo de fontes em causa. Estas medidas poderão estar directamente relacionadas com o tráfego, mas também com outro tipo de fontes, em área ou pontuais. O estabelecimento destas medidas de curto prazo constituirá ainda uma ferramenta útil no suporte à decisão das políticas definidas nos Planos e Programas. Apresentam-se, de seguida, alguns planos de acção de curto prazo com resultados imediatos na mitigação de emissões. Estes poderão ser aplicados, ao nível administrativo local, quando se prevê um episódio de partículas e/ou ozono em determinada área.

- Medidas de actuação ao nível do tráfego rodoviário ( $O_3$ ,  $PM_{10}$ )

Os veículos pesados de mercadorias são uma das principais fontes emissoras de  $PM_{10}$  e  $NO_x$  provenientes do tráfego rodoviário [Tchepel, 2003]. A sua circulação nos centros das cidades, a

baixas velocidades, provoca ainda maiores emissões destes poluentes. A proibição ou restrição de acesso ao centro da cidade, através do fornecimento de vias alternativas, nos dias esperados críticos, irá provocar uma diminuição da concentração de poluentes no centro urbano, quer de precursores de  $O_3$ , quer de  $PM_{10}$  [Alary *et al.*, 1995]

Tendo ainda em conta a percentagem de veículos em circulação, outra medida importante poderá ser a redução dos veículos privados em circulação, de forma a promover uma maior taxa de ocupação dos veículos de passageiros e uma redução da distância percorrida por veículos privados. Estas medidas podem passar pela restrição de circulação em locais específicos nas cidades, pela aplicação de taxas à entrada das localidades, ou ainda pela facilitação/gratuidade do uso de transportes colectivos e de parques de estacionamento periféricos. Em alguns países foi já testada, em dias em que se previa episódios de poluição elevada, a implementação de um sistema de circulação baseado nas placas de matrícula, permitindo a entrada alternada a pares ou ímpares. É de notar, no entanto, que estas políticas de transporte terão de estar forçosamente aliadas a uma filosofia de tecnologia “limpa” nos meios de transporte públicos (e privados), caso contrário o objectivo mitigador será comprometido [INTEGAIR, URL 23].

- Medidas ao nível da combustão doméstica/residencial ( $PM_{10}$ )

O aquecimento doméstico por lareiras foi identificado como uma importante actividade emissora de partículas, para além de compostos gasosos resultantes da combustão [IA, 2005b]. Esta fonte de emissões é particularmente nociva em dias de Inverno com elevado grau de estabilidade ou inversão térmica. Nestas situações justificar-se-á o alerta para a não utilização deste meio de aquecimento e a sua substituição por outro menos poluente.

- Redução de poeiras vindas de obras ( $PM_{10}$ )

As zonas de construção são, por excelência, fontes importantes para as partículas no ar ambiente [URL24]. A aplicação de medidas específicas para estes locais, como: separação destas zonas de obras da via pública, utilização de filtros de partículas obrigatórios para as máquinas e motores associados à actividade de construção e lavagens dos veículos à saída das obras, poderão contribuir significativamente para o decréscimo de  $PM_{10}$  no ar ambiente.

- Limpezas de ruas ( $PM_{10}$ )

A ressuspensão de poeiras constitui uma importante fonte de partículas em suspensão, com uma magnitude semelhante, ou superior, às emissões geradas ao nível do tubo de escape. Estudos recentes indicam que o varrimento e a lavagem de ruas (com recurso a água resultante de outros

usos) contribuem para a remoção de partículas em suspensão no ar ambiente. Trata-se de um tipo de medidas recente, cuja eficácia de redução, quer a curto, quer a longo prazo, ainda está em fase de teste. No entanto, estudos apontam para que estas devam ser adoptadas com previsíveis implicações nos vários sectores e fontes de  $PM_{10}$  [CCDR-LVT, 2006].

- Medidas ao nível da sensibilização/recomendações ( $O_3$ ,  $PM_{10}$ )

As várias medidas enumeradas, e outras possíveis para além destas, dependerão da consciencialização, participação e alteração dos hábitos da população. Neste sentido, a sensibilização e recomendações às populações, empresários ou autarquias serão fulcrais para uma eficiente gestão da qualidade do ar. Esta sensibilização poderá ser feita através dos meios de comunicação, informando e divulgando, numa primeira instância, sobre as eventuais medidas de curto-prazo e a sua importância e, numa segunda fase, alertando para a sua aplicação.

Esta campanha de educação e informação do público é particularmente importante para as medidas de mitigação das emissões de transportes. Será fundamental para promover os transportes públicos, que até ao momento se consideraram como transporte de segunda categoria. Mas, para que esta promoção resulte, é indispensável coordená-la e aliá-la a uma melhoria dos serviços prestados por este tipo de transportes, nomeadamente no que respeita a horários adequados, cumprimento dos mesmos, segurança e conforto.

Trata-se de uma medida de carácter educativo e informativo que será decisiva a curto prazo, com efeitos a longo prazo e repercussões em todos os sectores e respectivas fontes emissoras.





## Chapter VII.

### Conclusions

The development of a modelling system able to assess and predict the air quality over mainland Portugal was the main goal of this work and one of the requirements of the Air Quality Framework Directive. This objective is particularly important in areas where monitoring network do not have sufficient spatial coverage and historical datasets. In fact, the national air quality monitoring network is restricted in terms of number and spatial representation of monitoring sites, highly concentrated over the two main urban centers of Lisbon and Porto and only recently (after 2003) extended for other areas and pollutants. Nevertheless, the analysis of the available measured data identified  $O_3$  and  $PM_{10}$  as the most critical pollutants in Portugal, with several exceedances of limit values over the last decade.

A numerical modelling system, based on the MM5 meteorological mesoscale model and on the CHIMERE chemistry-transport model, was selected and adopted for this study. This modelling system was applied first at a European level and then nested to the mainland Portugal domain, with a  $10 \times 10 \text{ km}^2$  resolution, forced at the boundaries by the large-scale simulation, for long-term mode (2001 to 2006) and real-time forecast, and for both gas and aerosols pollutants. In order to validate the model application, a detailed model evaluation was performed, according to the quality assurance/quality control procedures. The comparison between modeled and observed values, over the entire long-term period (2001 year) reveals a modelling system able to capture the spatial and temporal variability of  $O_3$  and  $PM_{10}$ , with satisfactory normalized errors and correlation coefficients (often exceeding 0.60), particularly for background stations. However, there is an overall negative systematic bias, namely for  $PM_{10}$ , which can be explained by overestimation of urban emissions, underprediction of the vertical mixing in urban area, and also measurements uncertainties. The larger errors at traffic and industrial sites should be due to the representativeness of stations in the model grid cells and to emissions estimation errors. Spectral decomposition of observed and modelled time series indicates that synoptic and long-term time scales are well captured by the CHIMERE model,

suggesting that modelling periods should be longer than a single episode to increase confidence in the regulatory modelling applications. This was also confirmed by model uncertainty evaluation performed according to the legislated model quality indicators.

Air quality assessment was then performed for each pollutant regarding the fulfillment of the thresholds defined by each Daughter Directive. Modelling results for 2001 shows that there were areas where  $O_3$  concentrations exceed the legislated target values. In what concerns human protection limit values, these areas are located close to Porto and Lisbon, but regarding accumulated  $O_3$  threshold (AOT) for vegetation protection, the most affected areas are the inland central part and southwest coast of Portugal. For PM, the highest concentrations (exceeding limit values) are found over the main cities of Lisbon and Porto and close to suburban areas, due to the concentration of primary anthropogenic emissions. Rural areas, away from important emission sources, undergo background aerosol pollution levels, except for a few locations, which are influenced by point source emissions. The impact on air quality of emission scenarios was also evaluated using this modelling system, specifically in what concerns the national emissions ceilings (NEC) scenarios for 2010 and the forest fire emissions estimated for 2003. The NEC scenarios prove to be efficient to achieve the air quality standards defined for 2010. Regarding forest fire emissions, modelling results show a strong influence on air quality observed in summer 2003 being responsible for about 30% of PM and  $O_3$  exceedances.

Concerning the air quality forecast purpose, both model approaches (statistical and numerical) were able to predict  $O_3$  peaks and the daily average of  $PM_{10}$ . Nevertheless, regarding the monitoring network restriction, only the numerical forecasting system shows competence for predicting air pollution at a national level. The MM5 meteorological model presents a high-quality forecast performance for temperature and wind prognostic, and the occurrences of exceedances to limit values (hourly for  $O_3$  and daily for  $PM_{10}$ ) are forecasted by the CHIMERE model in about 55% of the cases, with a 40% rate of false alarms.

This first air quality assessment work for Portugal shows that besides the complexity of the formation mechanisms of gas and aerosols pollutants and the uncertainty level of input data involved, this modelling system can be used in the future as a reliable tool for the definition of long-term and real-time air pollution abatement strategies, as well as for scientific purposes on the research of the origin and transport of pollutants at the regional scale. Nevertheless, the results of validation exercise calls for improving model system in several aspects related to the chemistry-transport model, such as grid resolution and on the intra-day and diurnal cycle processes, improving vertical mixing and dry deposition. Future model developments should also focus on emissions estimation, and especially in what concerns model injection of forest fire emissions. In terms of air quality forecast, an ensemble of the two different approaches (statistical and numerical) should improve model prediction, at least at the main urban centers of Porto and Lisbon where a statistical model was developed.

## Capítulo VII

### 7. Conclusões

O trabalho apresentado teve como principais objectivos o desenvolvimento e a aplicação de um sistema que permitisse realizar a avaliação, passada e presente, da qualidade do ar em Portugal Continental, para além de efectuar a sua previsão operacional diária.

O estudo foi iniciado com a caracterização da qualidade do ar, em termos de  $O_3$  e  $PM_{10}$ , recorrendo aos dados de monitorização existentes ao longo dos anos de 2001 a 2006. A selecção e análise de um conjunto de 4 estações com dados válidos durante este período e distribuídas geograficamente pelas várias CCDRs permitiu concluir que existem situações de incumprimento dos valores limite estabelecidos para a protecção da saúde humana, para ambos os poluentes. As duas estações localizadas na região norte (Teixugueira e Vila Nova da Telha) apresentam concentrações superiores às restantes, sendo, contudo, na estação de Teixugueira que se registam os valores máximos mais elevados e o maior número de excedências aos limiares legislados. Na série de anos analisada, não se verifica nenhuma tendência clara para a evolução da qualidade do ar, apesar de se identificar 2003 e 2005 como anos críticos, apontando-se a grande ocorrência de incêndios florestais como uma das possíveis justificações para a degradação da qualidade do ar.

A análise dos dados observados, juntamente com os relatórios da qualidade do ar publicados, confirmam que o ozono e as partículas constituem poluentes particularmente críticos no panorama nacional, registando todos os anos excedências aos valores limite legislados e constituindo uma ameaça para a saúde humana. Por este motivo, foram estes os principais poluentes alvo de estudo na avaliação e previsão da qualidade do ar realizadas.

A deficiente cobertura espacial das redes regionais de monitorização da qualidade do ar existentes e a escassez e limitação dos dados obtidos em campanhas experimentais impedem, porém, a realização de um diagnóstico completo e representativo. Neste sentido, e de acordo com as

recomendações da Directiva Quadro 96/62/EC, a modelação numérica da qualidade do ar ganha importância acrescida como meio de avaliação e prognóstico do ar ambiente ao nível nacional.

Para o caso de estudo de Portugal Continental, foi seleccionado um sistema de modelos que integra o modelo meteorológico MM5 e o modelo químico de transporte CHIMERE, ambos disponíveis e criados com o intuito de desenvolvimento e uso científico. O sistema de modelos foi aplicado recorrendo a uma técnica de “nesting” unidireccional, tendo sido efectuada uma primeira simulação à escala continental, com uma resolução de malha de  $50 \times 50 \text{ km}^2$ , e de seguida, usando estes resultados como condições iniciais e fronteira, realizada uma simulação de maior resolução para o domínio de Portugal Continental ( $10 \times 10 \text{ km}^2$ ).

Apesar da sua vasta aplicação a nível europeu e mundial, a sua implementação para o caso de Portugal necessitou de uma extensa validação que viabilizasse a sua utilização como sistema de diagnóstico da qualidade do ar. Este processo de validação foi feito através da comparação (qualitativa e quantitativa) dos seus resultados com os dados medidos nas estações de monitorização e permitiu demonstrar que o sistema de modelação tem capacidade para reproduzir correctamente a distribuição espacial e temporal dos poluentes em estudo, observada nas várias estações de fundo. Relativamente aos poluentes fotoquímicos,  $\text{O}_3$  e  $\text{NO}_2$ , os coeficientes de correlação e os desvios calculados indicam que as diferenças entre os valores observados e simulados são baixas ( $r > 0,65$  e  $\text{EQM} \approx 22 \mu\text{g m}^{-3}$  para  $\text{O}_3$ ), tornando-se ainda mais reduzidas quando é analisada a soma destes dois componentes ( $\text{O}_x$ ). Este resultado sugere que os erros se relacionam com a rápida conversão  $\text{O}_3\text{-NO}_2$  e, como tal, podem ser devidos, em grande parte, à representatividade das estações na grelha do modelo ou a incorrecções na estimativa das emissões de  $\text{NO}_x$ . Apesar disso, o modelo foi capaz de reproduzir os vários episódios de ozono e de prever as ultrapassagens registadas nas estações. O período do Verão simulado foi ainda decomposto espectralmente nas várias escalas temporais (intradiurna, diurna, sinóptica e longo-termo), revelando a capacidade do modelo para capturar as contribuições relativas destas componentes. O modelo demonstrou, contudo, alguma subestimativa da variabilidade intradiurna e uma sobrestimativa das flutuações diurnas. Este desempenho inferior do modelo em simular escalas temporais refinadas poderá estar relacionado com a baixa resolução horizontal usada, menos eficiente para descrever os processos típicos destas escalas espaço-temporais. O melhor comportamento do modelo na simulação de escalas temporais longas reforça a confiança para a sua aplicação na avaliação de longo prazo, como é objectivo deste trabalho.

O exercício de validação relativo às partículas revelou também um desempenho satisfatório do sistema de modelos na simulação da química de aerossóis ( $r > 0,6$  e  $\text{EQM} < 40 \mu\text{g m}^{-3}$ ), apesar de uma sobrestimativa dos valores de concentração de  $\text{PM}_{10}$ , aliada a uma provável sobrestimativa dos respectivos dados de emissões, em especial na zona Norte do país. Tal facto é corroborado pelo exercício de intercomparação e avaliação realizado com os vários inventários com dados disponíveis

para Portugal (INERPA, LOTOS e EMEP), onde se conclui que apesar do inventário nacional (INERPA) ser o recomendado, existem algumas falhas na espacialização das emissões.

A confiança nos resultados do modelo após validação permitiu obter, pela primeira vez, um diagnóstico dos valores de concentração para os vários poluentes gasosos e em fase particulada, para todo o território nacional e durante um longo período de tempo. É de salientar este recente avanço e a importância desta avaliação no conhecimento do impacto ambiental e da exposição a longo prazo ao ozono e partículas, cujos efeitos, a par com os efeitos agudos, são igualmente perniciosos e tidos em conta no último Decreto-Lei regulador de cada um destes poluentes.

A análise dos resultados da modelação para cada um dos poluentes permitiu identificar as áreas mais problemáticas em termos de poluição atmosférica e avaliar o cumprimento da legislação nacional/europeia existente e em fase de proposta. Para o caso específico do  $\text{NO}_2$  o modelo simulou a existência, em 2001, de ultrapassagens do valor para a protecção da saúde humana nas áreas urbanas de Lisboa e Porto. Os resultados da modelação para o  $\text{SO}_2$ , para 2001, revelam a existência de excedências dos parâmetros legislados, quer para a protecção da saúde humana (valor limite a ser cumprido até 2005), quer da vegetação (valor limite em vigor desde 2001). Este incumprimento limita-se, no entanto, às áreas limítrofes e vizinhas de grandes unidades industriais, nomeadamente das centrais termoeléctricas. O ozono é outro dos poluentes simulados que apresenta ultrapassagens, quer ao nível do limiar de informação ao público, quer no que diz respeito ao valor alvo de protecção da vegetação (AOT40). A área em incumprimento, em 2001, relativamente a este último parâmetro localiza-se no interior centro-norte do país e na costa Vicentina. As simulações efectuadas para dias de episódio de  $\text{O}_3$  sugerem, contudo, a existência de áreas mais vastas com ultrapassagem dos limiares horários, algumas delas não cobertas pelas redes regionais de monitorização da qualidade do ar.

O único poluente gasoso em cumprimento com a legislação nacional e comunitária, em vigor, é o  $\text{CO}$ , o qual não apresenta nenhuma área em excedência, nem com valores considerados críticos. Em termos de aerossóis, os resultados apontam para uma ultrapassagem dos valores limite (acrescidos da respectiva margem de tolerância) de  $\text{PM}_{10}$  e  $\text{PM}_{2,5}$  sobre as aglomerações do Porto e Lisboa, enquanto que as concentrações de fundo nas regiões interiores e rurais são consideravelmente mais baixas. Tal facto deverá ser uma consequência directa da distribuição espacial e quantitativa das emissões de partículas. Por outro lado, a distribuição similar dos mapas de  $\text{PM}_{10}$  e  $\text{PM}_{2,5}$  sugere que a maior fracção de partículas (mais de 50%) terá tamanhos inferiores a  $2,5 \mu\text{m}$ . Uma análise sazonal permitiu verificar que no Verão as concentrações médias de  $\text{PM}_{10}$  aumentam nas regiões interiores e rurais e diminuem nas zonas mais urbanas. Apesar de não terem sido passíveis de validação, a avaliação da qualidade do ar foi ainda estendida a outros compostos, nomeadamente à fracção orgânica do aerossol atmosférico, revelando valores mais elevados na região do Grande Porto.

Esta avaliação, por parâmetro legislado, permite verificar a importância do estabelecimento e imposição de vários valores limite para cada um dos poluentes. Verificou-se que o cumprimento de um deles não implica a não ultrapassagem dos restantes valores limite impostos. O exemplo do ozono confirma este facto, dado que o valor alvo para a protecção da vegetação é cumprido nas áreas urbanas de Lisboa e Porto, ao contrário do valor alvo para a protecção da saúde humana que é ultrapassado em ambas as regiões.

Esta fase de avaliação incluiu ainda uma análise integrada dos resultados da simulação numérica em termos de poluição, entre os anos 2001, 2004 e 2006, visando uma melhor compreensão da evolução temporal e da distribuição espacial da qualidade do ar para os principais poluentes. Esta análise revelou uma redução significativa, ao longo dos 3 anos, nas concentrações urbanas de partículas, apesar de um aumento das concentrações de fundo/fronteira de  $O_3$ . Tal facto poderá indiciar uma melhoria da qualidade do ar ao longo do tempo, podendo, no entanto, apenas reflectir condições específicas dos anos em estudo e não necessariamente uma tendência.

Para além do diagnóstico da qualidade do ar em Portugal, foi também feita a avaliação dos cenários futuros de emissões definidos pelo programa PTEN para 2010. Foi realizada uma simulação usando a meteorologia do ano de referência (2001) e o novo inventário de emissões tendo em conta os totais nacionais previstos para 2010 (e ainda para um cenário intercalar de 2005). Os resultados indicam uma melhoria significativa da qualidade do ar em relação a todos os poluentes (nomeadamente  $NO_x$  e  $O_3$ ), prevendo-se, em especial para 2010, um decréscimo dos níveis de ozono troposférico na envolvente às áreas urbanas de Lisboa e Porto, onde ocorreram, em 2001 incumprimento dos limiares de informação e alerta. Estes resultados reforçam a importância de se incluir o programa nacional para os TEN numa estratégia nacional de gestão da qualidade do ar.

O ano de 2003, que se pautou por condições extraordinárias de ocorrência de incêndios florestais, foi estudado separadamente, de modo a avaliar o seu impacto na qualidade do ar resultante. Para tal foi necessário estimar as emissões libertadas durante estes incêndios florestais com base no conhecimento da cobertura vegetal, área ardida e factores de emissão adequados e, posteriormente, integrá-las no processo de modelação da qualidade do ar. A estimativa das emissões horárias dos incêndios florestais revela valores duas ordens de grandeza superiores ao total emitido pelas restantes fontes emissoras. Por outro lado, a maior correlação existente entre os valores observados e os obtidos na simulação que incluiu as emissões de incêndios florestais demonstra a importância da incorporação destas emissões na modelação da qualidade do ar, sendo responsáveis por um aumento superior a 30% do número de excedências aos valores limite de  $O_3$  e  $PM_{10}$  registados em algumas das estações de monitorização.

O objectivo de previsão operacional da qualidade do ar para Portugal impôs a pesquisa dos vários métodos de previsão disponíveis e utilizados actualmente. Estes podem subdividir-se em métodos estatísticos e numéricos, sendo os primeiros dependentes de dados históricos, quer meteorológicos,

quer de qualidade do ar, permitindo apenas fazer a previsão para as áreas de abrangência dos postos de monitorização. Assim sendo, este método foi usado apenas para a previsão nas cidades de Lisboa e do Porto, áreas únicas em Portugal com uma rede de monitorização meteorológica e de qualidade do ar que permite estabelecer relações estatísticas entre estas variáveis. O desenvolvimento de um modelo de previsão exclusivamente dependente de condições meteorológicas revelou pouco sucesso, tendo sido necessária a introdução da variável de entrada referente à concentração observada no dia anterior para prever os níveis de  $O_3$  e  $PM_{10}$  com correlações bastante satisfatórias ( $r > 0.8$ ). As equações de regressão linear múltipla estabelecidas mostraram uma aplicação aceitável na quase totalidade da extensão de cada cidade, sendo capazes de responder a uma análise legislativa e eficientes numa previsão mais alargada (3 dias).

Para a previsão nacional, atendendo às características passadas e actuais da rede de qualidade do ar em Portugal e à distribuição espacial dos episódios de poluição atmosférica verificados, os métodos numéricos surgem como os mais adequados, não dependendo de dados históricos e permitindo ainda a entrada dos dados de emissões, parâmetro determinante na gestão da qualidade do ar. Apesar destes métodos implicarem grande complexidade e exigirem um desenvolvimento e esforço computacional elevado, foi seleccionado o mesmo sistema de modelos usado para a fase de avaliação da qualidade do ar de forma a aproveitar a experiência em simulação numérica e otimizar o seu funcionamento e aplicação. Esta operacionalização foi iniciada em 2004 para os poluentes gasosos, em período experimental, tendo sido estendida para a previsão de aerossóis em 2006 e divulgada ao público no início de 2007.

Em termos operacionais, são simulados 4 dias, uma vez que para minimizar os erros da modelação se inicia a previsão com a simulação do dia anterior, recorrendo a dados meteorológicos de análise. Isto permite um refinamento das condições iniciais para as simulações dos 3 dias seguintes de previsão propriamente dita. O sistema de modelos foi aplicado, utilizando os mesmos domínios (e respectivas resoluções de grelha) e as mesmas opções físicas definidas na fase de avaliação.

O desempenho do sistema de previsão foi avaliado, primeiro em termos da previsão meteorológica e, posteriormente, ao nível das concentrações de poluentes previstas, através da comparação entre dados simulados e observados ao longo dos 3 dias de previsão. A validação do modelo MM5 revelou um óptimo desempenho na previsão das variáveis meteorológicas (com factores de correlação superiores a 0,9 para a temperatura e 0,6 para a velocidade e direcção do vento), apesar de algumas falhas nas regiões costeiras e zonas interiores a altitude elevada. Relativamente ao modelo químico, e tal como já verificado nas simulações de longo prazo, é nas estações de fundo que se observam melhores correlações ( $r > 0,55$ ) e erros médios inferiores ( $< 20 \mu g m^{-3}$ ) entre os valores previstos e observados de  $O_3$  e  $PM_{10}$ . É de salientar que o erro sistemático é, em média, negativo nas estações com carácter urbano e industrial e positivo na maioria das estações do interior, indicando a hipótese de incorrecções ao nível da espacialização das emissões, em particular, de partículas. No caso do  $O_3$ ,



a subestimativa verificada nas estações do interior Norte (em particular em Lama de Olo, Vila Real) poderá estar relacionada com um transporte de poluentes do Norte de Espanha, cujas emissões não são contabilizadas no inventário usado na simulação para Portugal. Apesar disso, o sistema de previsão revelou capacidade para prever os episódios existentes, tanto de ozono como de partículas, com uma probabilidade de detecção superior a 55%, apesar de taxas de falsos alarmes também elevadas.

Após este período de teste e avaliação do sistema de previsão, os resultados foram divulgados numa página de Internet desenvolvida com o intuito de informação do público, possibilitando o acesso e a visualização imediata do índice de qualidade do ar global (tendo em conta o  $O_3$  e as  $PM_{10}$ ) previsto para o dia presente e os dois dias seguintes. Esta visualização facilita a percepção e a compreensão por parte do público, permitindo identificar de imediato quais as regiões mais críticas em termos de qualidade do ar.

Não obstante o nível de incerteza associado às várias simulações realizadas, o estudo apresentado permitiu desenvolver uma ferramenta validada e fiável para a avaliação da qualidade do ar, quer na vertente de diagnóstico da situação presente e passada, quer numa perspectiva de previsão diária das concentrações de poluentes. Para além do contributo inovador para o avanço do conhecimento do padrão de produção e transporte dos poluentes atmosféricos em Portugal, este sistema constitui um instrumento valioso para a gestão da qualidade do ar ao nível urbano e regional.

Há, no entanto, ainda um longo caminho a percorrer, quer ao nível do refinamento dos domínios de simulação (horizontais e verticais), quer ao nível dos dados de entrada, essenciais, por exemplo, para uma mais correcta simulação da componente intradiurna. Chama-se particular atenção para o trabalho, que deverá ser constante, ao nível da actualização do inventário de emissões, nomeadamente no que diz respeito à sua desagregação espacial e temporal e à incorporação do inventário espanhol no domínio de simulação. Para este último avanço proposto, a presente colaboração científica com o Centro de Supercomputação de Barcelona será determinante para a obtenção do inventário de emissões espanhol de alta definição.

É importante e essencial, como trabalho futuro, verificar as hipóteses colocadas como principais fontes de incerteza e origem dos erros, quer ao nível do inventário de emissões antropogénicas, quer da simulação meteorológica. Por outro lado, é urgente estender o exercício de validação aos vários componentes da matéria particulada ( $NO_3$ ,  $SO_4$ ,  $NH_3$  e SOA), o que implicará uma ampliação e modificações ao nível das redes regionais de monitorização ou a realização de campanhas experimentais pontuais que permitam a especiação destes compostos. Seria óptimo que estes planos de desenvolvimentos futuros fossem acompanhados pela referida ampliação ou prolongamento das redes regionais de monitorização da qualidade do ar, principalmente no interior do país, tornando mais consistente o processo de avaliação do sistema de modelação.

Será ainda pertinente incluir, nestas linhas de investigação futura, o refinamento da distribuição vertical das emissões dos incêndios florestais no modelo químico, para além da parametrização das taxas de fotólise, de forma a serem dependentes da concentração de aerossóis existente.

Em termos da previsão operacional da qualidade do ar, uma perspectiva possível e adequada, em termos futuros, será a utilização de métodos estatísticos como complemento do modelo numérico, devendo esta complementaridade incidir nos grandes centros urbanos onde é viável o desenvolvimento deste tipo de modelos.

Mantém-se em aberto uma vasta área de investigação, que permitirá não só avaliar a evolução da qualidade do ar a nível nacional a longo prazo, como testar cenários alternativos, quer de emissões, quer de ordenamento territorial, servindo de base para a elaboração dos chamados Planos e Programas. Só a continuação da investigação nesta área permitirá o desenvolvimento de políticas de controlo e gestão da qualidade do ar cada vez mais eficientes, capazes de garantir um crescimento económico sustentado, associado a mais e melhor qualidade de vida.

Sempre com a previsão pintada de verde...



## 8. Referências bibliográficas/References

ALARY, R., DONATI, J., VIELLARD, H. (1995). Motor-vehicle pollution in Paris affecting traffic and weather conditions. *Science of the Total Environment*, 169 (1-3), 53-61.

ALMEIDA, S.M., PIO, C.A., FREITAS, M.C., REIS, M.A., TRANCOSO, M.A. (2005). Source apportionment of fine and coarse particulate matter in a sub-urban area at the Western European Coast. *Atmospheric Environment*, 39, 3127-3138.

AMANN M. (2004). The RAINS model. Documentation of the model approach prepared for the RAINS peer review. Disponível em: [www.iiasa.ac.at/rains/](http://www.iiasa.ac.at/rains/)

ARNFIELD, A.J. (2003). Two decades of urban climate research: a review of turbulence, exchanges of energy and water, and the urban heat island. *International Journal of Climatology*, 23, 1-26.

ATKINSON, R., BAULSCH, D., COX, R., HAMPTON, R., KERR, J., ROSSI, M., TROE, J. (1997). Evaluated kinetics, photochemical and heterogeneous data. *J. Phys. Chem.*, 26(3), 521-1012.

AUMONT, B., CHERVIER, F., LAVAL, S. (2003). Contribution of HONO to the NO<sub>x</sub>/HO<sub>x</sub>/O<sub>3</sub> chemistry in the polluted boundary layer. *Atmospheric Environment*, 37, 487 - 498.

AQUILINA, N., DUDEK, A.V., CARVALHO, A., BORREGO, C., NORDENG, T.E. (2005). MM5 high resolution simulations over Lisbon. *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 7, 08685. SRef-ID: 1607-7962/gra/EGU05-A-08685. European Geosciences Union 2005.

BAKLANOV, A. (2006). Overview of the European project FUMAPEX. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6, 2005-2015.

BARBOSA, P., SAN-MIGUEL-AYANZ, J., CAMIA, A., GIMENO, M., LIBERTA, G., SCHMUCK, G. (2004). Assessment of fire damages in the EU Mediterranean Countries during the 2003 Forest Fire Campaign, Official Publication of the European Commission, S.P.I.04.64, Joint Research Center, Ispra.

BARROS, N. (1999). Poluição atmosférica por foto-oxidantes: o ozono troposférico na região de Lisboa. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente, 227 p.

BARROS, N., BORREGO, C., TOLL, I., SORIANO, C., JIMÉNEZ, P., BALSASANO, J.M. (2003). Urban Photochemical Pollution in the Iberian Peninsula: Lisboa and Barcelona Airsheds. *Air and Waste management Association*, 53, 347-359.

BATTYE, W., BATTYE, R. (2002). Development of emissions inventory methods for wildland fire; Final report, US-EPA, Research Triangle Park, North Carolina.

BERGE, E. (1993). Coupling of wet scavenging of sulphur to clouds in a numerical weather prediction model. *Tellus*, 45B, 1-22.

- BESSAGNET, B., HODZIC, A., VAUTARD, R., BEEKMANN, M., CHEINET, S., HONORÉ, C., LIOUSSE, C., ROUIL, L. (2004). Aerosol modelling with CHIMERE – Preliminary evaluation at the continental scale. *Atmospheric Environment*, 38, 2803-2817.
- BORREGO, C., COSTA, M.J., MARTINS, J.M., BARROS, N., COUTINHO, M., CONCEIÇÃO, M., MIRANDA, A.I., THOMAZ, S.F. (1994). Desenvolvimento de metodologias para o estudo da qualidade do ar em zonas costeiras. In: *Actas da 4ª Conferência Nacional Sobre a Qualidade do Ambiente*, 6-8 Abril, Universidade Nova de Lisboa, Portugal, Vol. II, M108-M117.
- BORREGO, C. (1996). Atmospheric pollution in coastal zones: mesoscale modelling applied to air quality studies. In: Eds. Caussade, B., Power, H. and Brebbia, C.A.: *Proceedings of the 4<sup>th</sup> Int. Conference on Air Pollution, Monitoring, Simulation and Control*, 28-30 August, Toulouse, France, Computational Mechanics Publ., 59-69.
- BORREGO, C., MIRANDA, A.I., CARVALHO, A.C., CARVALHO, A. (1999). Forest fires and air pollution: a local and global perspective. In: Brebbia, C.; Jacobson, M; Power, H. *Proceedings of the 7<sup>th</sup> Int. Conference on Air Pollution*, 26-28 July, California, USA, WIT Press, 741-750.
- BORREGO, C., MIRANDA, A.I., COUTINHO, M., FERREIRA, J., CARVALHO, A.C. (2002a). Air quality management in Portugal: example of needs and available tools. *Environmental Pollution*, 120, 115-123.
- BORREGO, C., TCHEPEL, O., MONTEIRO, A., MIRANDA, A.I., BARROS, N. (2002b). Influence of traffic emissions estimation variability on urban air quality modelling. *Water, Air and Soil Pollution: Kluwer Academic Publishers, Focus 2*, 487-499.
- BORREGO, C., SCHATZMANN, M., GALMARINI, S. (2003a). Quality Assurance of Air Pollution Models. In: Moussiopoulos N. Ed. *Air Quality in Cities - SATURN Final Report*, Springer, 155-183.
- BORREGO, C., TCHEPEL, O., COSTA, A.M., AMORIM, J.H., MIRANDA, A.I. (2003b). Emission and dispersion modelling of Lisbon air quality at local scale. *Atmospheric Environment*, 37, 5197-5205.
- BORREGO, C., MARTINS, H., TCHEPEL, O., SALMIM, L., MONTEIRO, A., MIRANDA, A.I. (2006a). How urban structure can affect city sustainability from an air quality perspective. *Journal of environmental modeling and software*, 21, 461-467.
- BORREGO, C., MIRANDA, A.I., MONTEIRO, A., MARTINS, H., FERREIRA, J., SALMIM, L., SOUSA, S., COUTINHO, M., PEREIRA, M. (2006b). *Elaboração de Planos e Programas de Acção para a melhoria da qualidade do ar na região Norte. Relatório Síntese 2001-2003*, Universidade de Aveiro AMB-QA-11/2006. Estudo realizado no âmbito de protocolo de colaboração com a CCDR-Norte.
- BORREGO, C., MONTEIRO, A., FERREIRA, J., MIRANDA, A.I., COSTA, A.M., CARVALHO, A.C., LOPES, M. (2007). Modelling uncertainty estimation procedures for air quality assessment. *International Environmental Journal* (in press).
- BOWMAN, D.M., JOHNSTON, F.H. (2005). Wildfire smoke, fire management, and human health, *EcoHealth*, 2(1), 76-80.
- CARTER, W. (1990). A detail mechanism for the gas-phase atmospheric reactions of organic compounds. *Atmospheric Environment*, 24, 481-518.
- CARVALHO, A. (2002). *Alterações Climáticas e Risco Meteorológico de Incêndio Florestal*. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção de Grau de Mestre em Gestão e Políticas de Ambiente. Aveiro, 116 p.
- CARVALHO, A. C., CARVALHO, A., GELPI, I., BARREIRO, M., BORREGO, C., MIRANDA, A.I., PEREZ-MUNUZURI, V. (2006). Influence of topography and land use on pollutants dispersion in the Atlantic coast of Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 40 (21), 3969-3982.
- CASTRO, L., PIO, C., HARRISON, R., SMITH, D.T.J. (1999). Carbonaceous aerosol in urban and rural European atmospheres: estimation of secondary organic carbon concentrations. *Atmospheric Environment*, 33, 2771-2781.

- CCDR-LVT - Comissão de Coordenação de Desenvolvimento Regional de Lisboa e Vale do Tejo (2006). Planos e Programas para a melhoria da qualidade do ar na Região de Lisboa e Vale do Tejo, 234 p. Disponível em: [www.ccdr-lvt.pt](http://www.ccdr-lvt.pt)
- CE - Guidance on the Annexes to Decision 97/101/EC on Exchange of Information as revised by Decision 2001/752/EC for the European Commission, DG Environment, 2002.
- CIVEROLO, K., HOGREFE, C., LYNN, B., D, ROSENTHAL, J., KUA, J., SOLECKI, W., COX, J., SMALL, C., ROSENZWEIG, C., GOLDBERG, R., KNOWLTON, K., KINNEY, P. (2007). Estimating the effects of increased urbanization on surface meteorology and ozone concentrations in the New York City metropolitan region. *Atmospheric Environment*, 41 (9), 1803-1818.
- CHENEVEZ, J., JENSEN, C. (2001). Operational ozone forecast for the region of Copenhagen by the Danish Meteorological Institute. *Atmospheric Environment*, 35, 4567-4580.
- COGLIANI, E. (2001). Air pollution forecast in cities by air pollution index highly correlated with meteorological variables, *Atmospheric Environment*, 35, 2871-2877.
- COLELLA, P., WOODWARD, P. (1984). The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of Computational Physics*, 11, 38-39.
- COM(2001)245 – Comissão Communication (2001). The Clean Air for Europe (CAFE) Programme: Towards a Thematic Strategy for Air Quality. Disponível em: [http://europa.eu.int/eur-lex/lex/LexUriServ/site/en/com/2001/com2001\\_0245en01.pdf](http://europa.eu.int/eur-lex/lex/LexUriServ/site/en/com/2001/com2001_0245en01.pdf)
- COM(2005)447 – Comissão Communication (2001). Proposta de Directiva do Parlamento Europeu e do Conselho relativa à qualidade do ar ambiente e a um ar mais limpo na Europa. Disponível em: [http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/site/pt/com/2005/com2005\\_0447pt01.pdf](http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/site/pt/com/2005/com2005_0447pt01.pdf)
- COUTINHO, M. (1995). As circulações atmosféricas de mesoscala na costa portuguesa – aplicação da teoria transiente da turbulência. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente, 185 p.
- COUTINHO, M., BORREGO, C. (1991). Photochemical production on coastal areas of Portugal. In: *Proceedings of the 19<sup>th</sup> International Technical Meeting of NATO - CCMS on Air Pollution Modeling and Its Applications*, 29 September - 4 October, Ierapetres, Crete, 129 - 136.
- DAMOAH, R., SPICHTINGER, N., FORSTER, C., JAMES, P., MATTIS, I., WANDINGER, U., BEIRLE, S., WAGNER, T., STOHL, A. (2004). Around the world in 17 days – hemispheric-scale transport of forest fire smoke from Russia in May 2003. *Atmos. Chem. Phys.*, 4, 1311-1321.
- DE MOORE, W., SANDETR, S., GOLDEN, D., HAMPTON, R., KURYLO, M., HOWARD, C., RAVISHANKARA, A., KOLB, C., MOLINA, M. (1994). Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modelling evaluation. JPL publication, 94, 26, JPL, Pasadena, US.
- DELLE MONACHE, L., STULL, R. (2003). An ensemble air-quality forecast over western Europe during an ozone episode. *Atmospheric Environment*, 37, 3469-3474.
- DGA - Direcção Geral do Ambiente (2001). Delimitação de zonas e aglomerações para avaliação da qualidade do ar em Portugal. Disponível em: [http://gasa.dcea.fct.unl.pt/dcea\\_dga](http://gasa.dcea.fct.unl.pt/dcea_dga).
- DGA-CE, Direcção Geral do Ambiente da Comissão Europeia (2000). A UE e a Qualidade do Ar. Serviço das Publicações Oficiais das Comunidades Europeias.
- DGF – Direcção-Geral das Florestas (2001). Inventário Florestal Nacional – 3ª Revisão, Direcção Geral das Florestas, Lisboa, 233 p.
- DGF – Direcção-Geral das Florestas (2003). Incêndios Florestais - 2003, Relatório provisório, Direcção Geral das Florestas, DSVFP - Divisão de Protecção e Conservação Florestal.

DGRF – Direcção-Geral dos Recursos Florestais (2006). Inventário das ocorrências de incêndios florestais em 2003, 2004 e 2005.

DRAXIER, R., HESS, G.D. (1998). An overview of the HYSPLIT\_4 modelling system for trajectories, dispersion and deposition. *Australian Meteorological Magazine*, 47 (4), 295-308.

DUDHIA, J. (1993). A nonhydrostatic version of the PennState/NCAR mesoscale model: Validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. *Mon. Wea. Rev.*, 121, 1493-1513.

DUSEK, U. (2000). Secondary Organic Aerosol – Formation Mechanisms and Source Contributions in Europe. IIASA Interim Report IR-00-066. Available at: <http://www.iasa.ac.at/Publications/>.

EC - European Commission (2004). San-Miguel-Ayanz, J., Barbosa, P., Camia, A., Kucera, J., Libertà, G., Schmuck, G., E. Schulte, Bucella, P., Colletti, L., and Flies, R., Forest Fires in Europe - 2003 fire campaign. Official Publication of the European Communities, SPI.04.124 EN.

EDER B., KANG, D., MATHUR, R., YU S., SCHERE, K. (2006). An operational evaluation of the Eta-CMAQ air quality forecast model. *Atmospheric Environment*, 40 (26), 4894-4905.

EEA – Environment European Agency (1997). European Topic Centre on Air Quality National Ozone Forecasting Systems and International Data Exchange in Northwest Europe, Report of the Technical Working Group on Data Exchange and Forecasting for Ozone Episodes in Northwest Europe (TWG-DFO). Editors van Aalst, R.M., De Leeuw, Faam.

EEA – Environment European Agency (1998). Guidance Report on Preliminary Assessment under EC Air Quality Directives. Disponível em: <http://reports.eea.europa.eu/TEC11a/en/tech11.pdf>.

EEA – Environment European Agency (1999). Criteria for EUROAIRNET - The EEA Air Quality Monitoring and Information Network. Disponível em: <http://reports.eea.europa.eu/TEC12/en/>.

EEA – Environment European Agency (2006). EMEP/CORINAIR Emission Inventory Guidebook – 2006. Technical report No 11/2006. Disponível em: <http://reports.eea.europa.eu/EMEPCORINAIR4>

ELBIR, T. (2003). Comparison of model predictions with the data of an urban air quality monitoring network in Izmir, Turkey. *Atmospheric Environment*, 37, 2149–2157.

EVTYUGINA, M., NUNES, T., PIO, C., COSTA, C. (2006). Photochemical pollution under sea breeze conditions, during summer, at the Portuguese West Coast. *Atmospheric Environment*. 40, 6277-6293.

EVTYUGINA, M., NUNES, T., ALVES, C., MARQUES, M.C. (2007). Atmospheric volatile organic compounds in a Portuguese mountain region. In: Eds. Borrego, C. and Brebbia, C.A.: *Proceedings of the 15<sup>th</sup> International Conference on Air Pollution*, 23-25 Algarve, Portugal, WIT Trans. Ecology and the Environment, 101, 455-466.

FERGUSON, S.A., PETERSON, J., ACHESON, A. (2001). Automated, Real-Time Predictions of Cumulative Smoke Impacts from Prescribed Forest and Agricultural Fires. In: *Proceedings from the 4<sup>th</sup> Symposium on Fire and Forest Meteorology*, 13-15 November, Reno, Nevada, American Meteorological Society, 168-175.

FERREIRA, F., TENTE, H., TORRES, P., MESQUITA, S., SANTOS, E., ESGALHADO, F., JARDIM, D. (2001). Background levels of sulphur dioxide, nitrogen dioxide and ozone in Portugal. In: *Proceedings of the Int. Conference Measuring Air Pollutants by Diffusive Sampling*, European Commission-JRC, 139-149.

FERREIRA, F., TENTE, H., TORRES, P., NOGUEIRA, L., MEIRELES, P. (2002). Integrating diffusive sampling and monitoring stations to evaluate air quality in urban areas. In: *Proceedings of the 4<sup>th</sup> Int. Conference on Urban Air Quality - Measurement, Modelling and Management*, 25-27 March, Prague, Czech Republic, 258-261.

FERREIRA, J., CARVALHO, A., CARVALHO, A.C., MONTEIRO, A., MARTINS, H., MIRANDA, A.I., BORREGO, C. (2003). Chemical Mechanisms in two photochemical modelling systems: a comparison procedure. In: Eds Carlos Borrego and Selahattin Incecik: *Proceedings of the 26<sup>th</sup> Int. Tech. Meeting of NATO-CCMS on Air Pollution Modelling and its Application*, 26-30 May, Istanbul, Turkey, Kluwer Academic/ Plenum Publishers, New York, 87-96.

- FERREIRA, J., SALMIM, L., MONTEIRO, A., MIRANDA, A. I., BORREGO, C. (2004). Avaliação de episódios de ozono em Portugal através da modelação fotoquímica. In: Actas da 8ª Conferência Nacional de Ambiente, 27-29 Outubro, Lisboa, Portugal, 383-384. Artigo publicado em CD-Rom.
- FERREIRA, J., MIRANDA, P. (2005). Numerical simulation of upwelling with a coupled atmosphere-ocean model. European Geosciences Union General Assembly 2005, X086, EGU05-A-03650:AS2.02-1FR3P-0086.
- FLEMMING, J., STERN, R. (2007). Testing model accuracy measures according to the EU directives - examples using the chemical transport model REM-CALGRID. *Atmospheric Environment* (in press).
- FRENCH, N., GOOVAERTS, P., KASISCHKE, E. (2004). Uncertainty in estimating carbon emissions from boreal forest fires. *J. Geophys. Res.*, 09, D14S08, doi:10.1029/2003JD003635.
- GARDNER, M., DORLING, S. (2000). Statistical surface ozone models: an improved methodology to account for non-linear behaviour. *Atmospheric Environment*, 34, 21-34.
- GELENCSÉR, A., MAY, B., SIMPSON, D., SÁNCHEZ-OCHOA, A., KASPERGIEBL, A., PUXBAUM, H., PIO, C., LEGRAND, M. (2007). Source apportionment of PM<sub>2.5</sub> organic aerosol over Europe: primary/secondary, natural/anthropogenic, fossil/biogenic origin. *Journal of Geophysics Research* (in press).
- GELBARD, F., SEINFELD, J. (1980). Simulation of multicomponent aerosol dynamics. *Journal of colloid and Interface Science*, 78, 485-501.
- GENEMIS (Generation of European Emission Data for Episodes) Project (1994): EUROTRAC Annual Report, 1993, Part 5. EUROTRAC International Scientific Secretariat, Garmisch-Partenkirchen.
- GERON, C., GUENTHER, A., PIERCE, T. (1994). An improved model for estimating emissions of volatile organic compounds from forests in the Eastern United States. *Journal of Geophysical Research* 99 (D6), 12773-12791.
- GIGLIO, L., VAN DER WERF, G., RANDERSON, J. T., COLLATZ, G. J., KASIBHATLA, P. S. (2006). Global estimation of burned area using MODIS active fire observations, *Atmos. Chemical and Physics*, 6, 957-974.
- GINOUX, P., CHIN, M., TEGEN, I., PROSPERO, J.M., HOLBEN, B., DUBOVIK, O., LIN, S.J. (2001). Sources and distributions of dust aerosols simulated with the GOCART model. *Journal of Geophysical Research*, 106, 20255 - 20273.
- GROSJEAN, D., SEINFELD, J. (1989). Parameterization of the formation potential of secondary organic aerosols. *Atmospheric Environment*, 23, 1733-1747.
- GUELLE, W., BALKANSKI, Y., DIBB, J., SCHULZ, M., DULAC, F. (1998). Wet deposition in a global size-dependent aerosol transport model. 2. Influence of the scavenging scheme on Pb vertical profiles, and deposition. *Journal of Geophysical Research*, 103 (D22), 28875-28891.
- GÜNTHER, A. (1997). Seasonal and spatial variations in the natural volatile organic compound emissions. *Ecol. Appl.*, 7(1), 34-45.
- HANNA, S.R., CHANG, J.C., STRIMAITIS, D.G. (1993). Hazardous gas model evaluation with field observations. *Atmospheric Environment*, 27A, 2265-2285.
- HANNA S.R., EGAN B.A., PURDUM J. (2001a). Evaluation of the ADMS, AERMOD, and ISC3 dispersion models with the OPTEX, Duke Forest, Kincaid, Indianapolis and Lovett field datasets. *International Journal of Environment and Pollution*, 16 (1-6), 301-314.
- HANNA, S.R., LU, Z., FREY, H.C., WHEELER, N., VUKUVICH, J. (2001b). Uncertainties in predicted ozone concentrations due to input uncertainties for the UAM-V photochemical grid model applied to the July 1995 OTAG domain. *Atmospheric Environment*, 35(5), 891-903.
- HASS, H., VAN LOON, M. KESSLER, C., MATTHIJSEN, J., SAUTER, F., STERN, R., ZLATEV, R., LANGNER, J., FORTESCU, V., SCHAAP, M. (2003). Aerosol modeling: results and intercomparison from European



Regional-scale Modeling Systems. A contribution to the EUROTRAC-2 subproject GLOREAM. EUROTRAC report.

HESS, G., COPE, M., LEE, S., MANINS, P., MILLS, G., PURI, K., TORY, K. (2001). The development of the Australian air quality forecasting system: current status. In: Ed. Gryning and Schiermeier: Proceedings of the 24<sup>th</sup> International Technical Meeting on Air Pollution Modeling and Its Applications, 15-19 May, Boulder, Colorado, 2000, Kluwer Academic, New York, 371-378..

HODZIC, A., VAUTARD, R., BESSAGNET, B., LATTUATI, M., MORETO, F. (2005). Long-term urban aerosol simulation versus routine particulate matter. *Atmospheric Environment*, 39, 5851-5864.

HODZIC, A., VAUTARD, R., CHAZETTE, P., MENUT, L., BESSAGNET, B. (2006a). Aerosol chemical and optical properties over the Paris area within ESQUIF project, *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 6, 401-454.

HODZIC, A., VAUTARD, R., CHEPFER, H., GOLOUB, P., *et al.* (2006b). Evolution of aerosol optical thickness over Europe during the August 2003 heat wave as seen from POLDER data and CHIMERE model simulations, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 1853-1864.

HODZIC, A., MADRONICH, S., BOHN, B., MASSIE, S., MENUT, L., WIEDINMYER, C. (2007). Wildfire particulate matter in Europe during summer 2003: meso-scale modeling of smoke emissions, transport and radiative effects. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 7, 4705-4760.

HOGREFE, C., RAO, S.T., KASIBHATLA, P., HAO, W., SISTLA, G., MATHUR, R., MCHENRY, J. (2001). Evaluating the performances of regional-scale photochemical modelling systems: Part II - ozone predictions. *Atmospheric Environment*, 35, 4175-4188.

HOLMES, N., MORAWSKA, L. (2006). A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: an overview of different dispersion models available. *Atmospheric Environment*, 40 (30), 5902-5928.

HOROWITZ, L., WALTERS, S., MAUZERALLES, D., EMMONDS, L., RASH, P., GRANIER, C., TIE, X., LAMARQUE, J., SCHULTZ, M., TYNDALL, G., ORLANDO, J., BRASSEUR, G. (2003). A global simulation of tropospheric ozone and related tracers: Description and evaluation of MOZART, version 2. *Journal of Geophysical Research*, 108 (D24), 4784.

IA - INSTITUTO DO AMBIENTE (2002a). Programa para os Tectos de Emissão Nacional: Estudos de Base - Cenário de Referência.

IA - INSTITUTO DO AMBIENTE (2002b). Programa para os Tectos de Emissão Nacional: Estudos de Base - Cenário de Cumprimento.

IA - INSTITUTO DO AMBIENTE (2004). Programa para os Tectos de Emissão Nacional: Estudos de Base - Medidas para o controlo das emissões nacionais de COVNM.

IA - INSTITUTO DO AMBIENTE (2005a). Relatório do Estado do Ambiente 2004. ISBN 972-8577-24-9. Disponível em: [www.ambiente.pt](http://www.ambiente.pt).

IA - INSTITUTO DO AMBIENTE (2005b). Portuguese National Inventory Report on Greenhouse Gases, 1990-2003. Disponível em: [www.ambiente.pt](http://www.ambiente.pt).

ICHIKAWA, Y., SADA, K. (2002). An atmospheric dispersion model for the environment impact assessment of thermal power plants in Japan – a method for evaluating topographical effects. *Journal of Air and Waste Management Association*, 52, 313-323.

IIASA (2000). Secondary Organic Aerosol – Formation Mechanisms and Source Contributions in Europe. Interim Report IR-00-066. Disponível em: [www.iiasa.ac.at/Publications/Documents](http://www.iiasa.ac.at/Publications/Documents)

IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change (2001). Climate Change 2001: The Scientific Basis. Eds: Houghton, J., Ding, Y., Griggs, D., *et al.*: Cambridge Univ. Press, New York.

- JACOB, D.J. (2000). Heterogeneous chemistry and tropospheric ozone. *Atmos. Environment*, 34, 2131–2159.
- JAKOBS, H.J., FRIESE, E., MEMMESHEIMER M., EBEL, A. (2002). A Real-time Forecast System for Air Pollution Concentrations. A contribution to subproject GLOREAM. In: Eds. P.M. Midgley, M. Reuther: *Proceedings from the EUROTRAC-2 Symposium 2002*, Margraf Verlag, Weikersheim.
- JIMÉNEZ P., JORBA, O., PARRA, R., BALDASANO, J. M. (2006). Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: High-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment*, 40 (26), 5056-5072.
- KETZEL, M., WÄHLIN, P., GLASIUS, M. MØNSTER, J. BERKOWICZ, R., PALMGREN, F. (2006). Particle emissions from traffic and biomass burning – results of several studies in Denmark. *Geophysical Research Abstracts*, 8, 10165.
- KOLEHMAINEN, M., MARTIKAINEN, H., RUUSKANEN, J. (2001). Neural networks and periodic components used in air quality forecasting. *Atmospheric Environment*, 35, 815-825.
- KULMALA, M., LAAKSONEN, A., PIRJOLA, L., (1998). Parameterization for sulfuric acid/water nucleation rates. *Journal of Geophysical Research*, 103 (D7), 8301-8307.
- LATTUATI, M. (1997). Contribution à l'étude du bilan de l'ozone troposphérique à l'interface de l'Europe et de l'Atlantique Nord: modélisation lagrangienne et mesures en altitude. Thèse de sciences, Université Paris 6, France.
- LEITÃO, P., FIGUEIREDO, J., CARVALHO, A.C., SANTOS, P. (2003). Modelação e Observação da Dispersão da Pluma e dos impactes sobre o meio receptor. Programa de Monitorização do Emissário Submarino de São Jacinto. Instituto Superior Técnico – Universidade de Aveiro.
- LEVINE, J., COFER, W., SEBACHER, D., WINSTEAD, E., RIGGAN, P., STOCKS, B., BRASS, J., AMBROSIA, V., BOSTON, P. (1989). Trace gas emissions from chaparral and boreal forest fires; *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 94 (D2), 2255 - 2259.
- LI, X., LIU, C., LEUNG, D., LAM, K. (2006). Recent progress in CFD modelling of wind field and pollutant transport in street canyons. *Atmospheric Environment*, 40 (29), 5640-5658.
- LIOUSSE, C., PENNER, J., CHUANG, C., WALTON, J., EDDLEMEN, H., CACHIER, H. (1996). A global three-dimensional model study of carbonaceous aerosols. *J. Geophys. Res.-Atmospheres* 101 (D14), 19411-19432.
- LIU, Y., CHEN, F., WARNER, T., SWERDLIN, S., BOWERS, J., HALVORSON, S. (2004). Improvements to surface flux computations in a non-local-mixing PBL scheme, and refinements on urban processes in the Noah land-surface model with the NCAR/ATEC real-time FDDA and forecast system. In: *Proceedings of the 20<sup>th</sup> Conference on Weather Analysis and Forecasting*, 11-15 January, Seattle, Washington, USA.
- LOOSMORE, G., CEDERWALL, R. (2004). Precipitation scavenging of atmospheric aerosols for emergency response applications: testing an updated model with new realtime data. *Atmos. Environ.*, 38, 993-1003.
- LUTERBACHER, J., DIETRICH, D., XOPLAKI, E., GROSJEAN, M., WANNER, H. (2004). European Seasonal and Annual Temperature Variability, Trends, and Extremes since 1500, *Science*, 303 (5663), 1499-1503.
- MADRONICH, S., MCKENZIE, R., BJORN, L., CALDWELL, M. (1998). Changes in biologically active ultraviolet radiation reaching the earth's surface. *J. Photochem. Photobiol. B: Biology*, 46, 5-19.
- MANNING, A.J. (2001). Predicting NO<sub>x</sub> levels in urban areas using two different dispersion models. *International Journal of Environment and Pollution* 16 (1-6), 292-300.
- MARQUES, F., FERREIRA, F., MESQUITA, S. (2007). Previsão da qualidade do ar nas Áreas Metropolitanas de Lisboa e Porto por métodos estatísticos. In: *Actas da 9ª Conferência Nacional do Ambiente*, Vol. 3, 834-839.
- MARTINS, V. (2007): Impacto dos incêndios florestais na qualidade do ar. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Engenharia do Ambiente, 96 p.

MCKEEN, S., WOTAWA, G., PARRISH, D., HOLLOWAY, J., BUHR, M., HUBLER, G., FEHSENFELD, F., MEAGHER, J. (2002). Ozone production from Canadian wildfires during June and July of 1995, *Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, 107 (D14), 4192, doi:10.1029/2001JD000697.

MEEHL, G., TEBALDI, C. (2004). More intense, more frequent, and longer lasting heat waves in the 21<sup>st</sup> century. *Science*, 305 (5686), 994-997.

MINGUZZI, E., BEDOGNI, M., CARNEVALE, C., PIROVANO, G. (2005). Sensitivity of CTM simulations to meteorological input. *International Journal of Environment and Pollution*, 24, No. 1/2/3/4.

MIRANDA, A.I. (1998). Efeito dos incêndios florestais na qualidade do ar. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente, 213 p.

MIRANDA, A.I. (2004). An integrated numerical system to estimate air quality effects of forest fires. *International Journal of Wildland Fire*, 13(2), 217-226.

MIRANDA, A.I., BORREGO, C., SOUSA, M., VALENTE, J., BARBOSA, P., CARVALHO, A. (2005a) - Model of Forest Fire Emissions to the Atmosphere. Dep. Ambiente e Ordenamento, Universidade de Aveiro. AMB-QA-07/2005. Deliverable D252 of SPREAD Project (EVG1-CT-2001-00043).

MIRANDA, A.I., BORREGO, C., VALENTE, J., SOUSA, M., SANTOS, P., CARVALHO, A. (2005b) – Smoke Production Report. Departamento de Ambiente e Ordenamento, Universidade de Aveiro. AMB-QA-10/2005. Deliverable D254 of SPREAD Project (EVG1-CT-2001-00043).

MIRANDA, A.I., MONTEIRO, A., LOPES, M., BORREGO, C., PEREZ, A.T. (2006). National emissions ceilings for 2005 and 2010 and their impact on Portuguese air quality. In: Eds. Longhurst, J. and Brebbia, C.A.: *Proceedings of the 14<sup>th</sup> Int. Conference on Air Pollution*, 22-24 May, New Forest, UK, WIT Press, 693-712

MONTEIRO, A., BORREGO, C., TCHEPEL, O., SANTOS, P., MIRANDA, A.I. (2001). Inventário de Emissões Atmosféricas – base de dados POLAR2. Aplicação à modelação atmosférica. In: *Actas da 7<sup>a</sup> Conferência Nacional sobre a Qualidade do Ambiente*, 18-20 Abril, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 954-958.

MONTEIRO, A. (2002). Poluição atmosférica na região de Aveiro: modelação de mesoscala e sua validação. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica, 113 p.

MONTEIRO, A., VAUTARD, R., BORREGO, C., MIRANDA, A.I. (2005a). Long-term simulations of photo oxidant pollution over Portugal using the CHIMERE model. *Atmospheric Environment*, 39, 3089-3101.

MONTEIRO, A., VAUTARD, R., LOPES, M., MIRANDA, A.I., BORREGO, C. (2005b). Air Pollution Forecast in Portugal: a demand from the new Air Quality Framework Directive. *Inter. Journal of Environment and Pollution*, 25, Nos 1/2/3/4.

MONTEIRO, A., BORREGO, C., MIRANDA, A.I., GOIS, V., TORRES, P., PEREZ, A.T. (2007a). Can air quality modelling improve emission inventories?. In: *Proceedings of the 6<sup>th</sup> International Conference on Urban Air Quality*, 26-30 March, Limassol, Cyprus, 13-14.

MONTEIRO, A., MIRANDA, A.I., BORREGO, C., VAUTARD, R. (2007b). Air quality assessment for Portugal. *Science of the Total Environment*, 373, 22-31.

MONTEIRO, A., SANTOS, P., MIRANDA, A.I., BORREGO, C., PEREZ, A.T. (2007c). Previsão operacional dos níveis de partículas em Portugal. In: *Actas da 9<sup>a</sup> Conferência Nacional de Ambiente*, 18-20 de Abril, Universidade de Aveiro, Portugal, 876-882.

MONTEIRO, A., MIRANDA, A.I., BORREGO, C., VAUTARD, R., FERREIRA, J., PEREZ, A.T. (2007d). Long-term assessment of particulate matter using CHIMERE model. *Atmospheric Environment*, doi:10.1016/j.atmosenv.2007.06.008.

- MOUSSIOPOULOS, N. (1996). State of art of air pollution modelling – needs and trends. In: Eds Caussade, B., Power, H. and Brebbia, C.A.: Proceedings of the 4<sup>th</sup> International Conference on Air Pollution, 26-28 July, California, USA, Computational Mechanics Publications, Southampton, Boston, 47-56.
- NAPPO, C.J., ESSA, K.S.M. (2001). Modeling dispersion from near-surface tracer releases at Cape Canaveral, FL. *Atmospheric Environment*, 35, 3999-4010.
- NENES, A., PILINIS, C., PANDIS, S. (1998). ISORROPIA: A new thermodynamic model for inorganic multicomponent atmospheric aerosols. *Aquatic Geochem.*, 4, 123-152.
- ODUM, J.R., JUNGKAMP, T., GRIFFIN, R., FORSTER, H., FLAGAN, R., SEINFELD, J.H. (1997). Aromatics, reformulated gasoline and atmospheric organic aerosol formation. *Environ. Sci. Technol.*, 31, 1890-1897.
- OLESEN, H.R. (2001). Ten years of harmonization activities: past, present and future. In: Proceeding of the 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modellinh for Regulatory Purposes, 28-31 May, Belgirate, Italy, 3-12.
- OLIVEIRA, T., PIO, C., ALVES, C., SILVESTRE, A., EVTYUGINA, M., AFONSO, J., CASEIRO, A., LEGRAND, M. (2007). Air quality and organic compounds in aerosols from a rural area over a year long period: characterisation, loads and seasonal trends. *Atmospheric Environment*. 41, 3631-3643.
- ONCLEY, S.P., DUDHIA, J (1995). Evaluation of surface fluxes from MM5 using observations. *Monthly Weather Review*, 123 (11), 3344-3357.
- ORDÓÑEZ, C., MATHIS, H., FURGER, M., HENNE, S., HÜGLIN, C., STAEHELIN, J., PRÉVÔT, A.S. (2005). Changes of daily surface ozone maxima in Switzerland in all seasons from 1992 to 2002 and discussion of summer 2003. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 1187 - 1203.
- PACE, G., MELONI, D., di SARRA, A. (2005). Forest fire aerosol over the Mediterranean basin during 20 summer 2003. *J. Geophys. Res.*, 110, D21202, doi:10.1029/2005JD005986.
- PANKOW, J.F. (1994). An absorption model of gas/aerosol partition involved in the formation of secondary organic aerosol. *Atmospheric Environment*, 28, 189–193.
- PANKOW, J.F., SEINFELD, J.H., ASHER, W.E., ERDAKOS, G.B. (2001). Modeling the formation of secondary organic aerosol. 1. Aplication of theoretical principles to measurements obtained in the  $\alpha$ -pinene,  $\beta$ -pinene, sabinene,  $\delta^3$ -carene and cyclohexene/ozone systems. *Environmental Sci. and Tech.*, 35, 1164–1172.
- PARRA, R., JIMÉNEZ, P., BALDASANO, J.M. (2006). Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north-eastern Iberian Peninsula (Catalonia, Spain). *Environmental Pollution*, 140, 200-219.
- PASSANT, N.R. (2002). Speciation of U.K. emissions of non-methane VOC, AEAT/ENV/0545.
- PIGEON, G., DURAND, P., MASSON, V. (2006). Evaluating parameterization of anthropogenic heat release in urban land surface scheme from field measurements and energy consumption inventory over Toulouse in CAPITOU. In: Proceedings of the AMS 6<sup>th</sup> Symposium on Urban Environment, 29 Jan-2Feb, Atlanta, GA, USA.
- PIO, C., LEGRAND, M., OLIVEIRA, T., AFONSO, A., SANTOS, C., CASEIRO, A., FIALHO, P., BARATA, F., PUXBAUM, H., SANCHEZ-OCHOA, A., KASPER-GIELB, A., GELENCSE, A., PREUNKERT, S., SCHOCK, M. (2007). Climatology of aerosol composition (organic versus inorganic) at non-urban areas on a West-East transect across Europe. *Journal of Geophysics Research* (in press).
- PITTAU M., ROMANO D., CIRILLO M., COPPI R. (1999). An optimal design for air pollution monitoring network. *Environmetrics*, 10 (3), 351-360.
- PHULERIA, H.C., FINE, P.M., ZHU, Y., SIOUTAS, C. (2005). Air quality impacts of the October 2003 Southern California wildfires, *J. Geophys. Res.*, 110 (D7), D07S20.

- PNAC (2002). Programa Nacional para as Alterações Climáticas - Volume 8: Floresta e Produtos Florestais, Cenário de Referência, Instituto do Ambiente, Portugal.
- POULIOT, G., PIERCE, T., VUKOVICH, J. (2005). Wildland fire emission modeling for CMAQ: an update. In: Proceedings of the 4<sup>th</sup> Annual CMAS Models-3 Users' Conference, 26-28 Sept., Chapel Hill, North Carolina.
- PUN, B., WU, S., SEIGNEUR, C., SEINFELD, J., GRIFFIN, R., PANDIS, A. (2003). Uncertainties in Modeling Secondary Organic Aerosols: Three-dimensional Modeling Studies in Nashville/Western Tennessee, Environ, Sci. Tech., 37, 3647-3661.
- PUN, B., WU, S., SEIGNEUR, C. (2007). Investigative modeling of new pathways for secondary organic aerosol formation. Atmospheric Chemistry and Physics, 7 (9), 2199-2216.
- QUEROL, X., ALASTUEY, A., RODRÍGUEZ, S., PLANA, F., RUIZ, C., COTS, N., MASSAGUÉ, G., PUIG, O. (2001). PM<sub>10</sub> and PM<sub>2.5</sub> source apportionment in the Barcelona Metropolitan area, Catalonia, Spain. Atmospheric Environment, 35, 6407-6419.
- QUIGLEY, E. (2002). UNIX SHELLS by example. Prentice Hall PTR Editors. ISBN 0-13-066538-X.
- REID N., MISRA P.K., AMMAN M., HALES J. (2007). Air quality modeling for policy development. Journal of Toxicology and Environmental Health-Part A, 70 (3-4), 295-310.
- RIBEIRO, C. (2005). Aplicação de um Modelo Meteorológico e de Qualidade do ar a Portugal. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica, 98 p.
- ROBESON, S.M., STEYN, D.G. (1989). A conditional probability density function for forecasting ozone air quality data. Atmospheric Environment, 23, 689-692.
- ROBESON, S.M., STEYN, D.G. (1990). Evaluation and comparison of statistical forecast models for daily maximum ozone concentrations. Atmospheric Environment, 24B, 303-312.
- RODRÍGUEZ, S., QUEROL, X., ALASTUEY, A., VIANA, M., ALARCÓN, M., MANTILLA, E., RUIZ, C. (2004). Comparative PM<sub>10</sub>-PM<sub>2.5</sub> source contribution study at rural, urban and industrial sites during PM episodes in Eastern Spain. Science of Total Environment, 328, 95-113.
- SALMIM, L. (2005). Avaliação da Qualidade do Ar: aplicação a cenários de emissões. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do Grau de Mestre em Poluição Atmosférica, 112 p.
- SANTOS, F. (2006). Análise das emissões de poluentes atmosféricos de fontes fixas industriais em Portugal Continental. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do Grau de Mestre em Poluição Atmosférica, 139 p.
- SCHAR, C., VIDALE, P.L., LUTHI, D., FREI, C., HABERLI, C., LINIGER, M. A., APPENZELLER, C. (2004). The role of increasing temperature variability in European summer heatwaves, Nature, 427 (6972), 332-336.
- SCHMIDT, H., DEROGNAT, C., VAUTARD, R., BEEKMANN, M. (2001). A comparison of simulated and observed ozone mixing ratios for the summer of 1998 in Western Europe. Atmospheric Environment, 35, 2449-2461.
- SEIGNEUR, C. (2005). Air pollution: Current challenges and future opportunities. AIChE J., 51(2), 356-364.
- SEILER, W., CRUTZEN, P. (1980). Estimates of gross and net fluxes of carbon between the biosphere and the atmosphere from biomass burning. Climate Change, Vol. 2 (3), 207-247.
- SEINFELD, J.H., PANDIS, S.N. (1998). Atmospheric Chemistry and Physics: From air pollution to climate change. John Wiley & Sons, New York. ISBN: 9780471178163.
- SIMPSON, D. (1992). Long period modeling of photochemical oxidants in Europe, Calculations for July 1985. Atmospheric Environment, 26, 1609-1634.

- SIMPSON, D., WINIWARTER, W., BÖRJESSON, G., CINDERBY, S., FERREIRO, A., GUENTHER, A., HEWITT, C., JANSON, R., KHALIL, M., OWEN, S., PIERCE, T., PUXBAUM, H., SHEARER, M., SKIBA, U., STEINBRECHER, R., TARRASÓN, L., ÖQUIST, M. (1999). Inventorying emissions from nature in Europe. *Journal of Geophysical Research*, 104 (D7), 8113-8152.
- STOHL, A., WILLIAMS, E., WOTAWA, G., KROMP-KOLB, H. (1996). A European inventory for soil nitric oxide emissions and the effect of these emissions on the photochemical formation of ozone. *Atmospheric Environment*, 30, 374-3755.
- SZOPA, S., HAUGLUSTAINE, D.A., VAUTARD, R., MENUT, L. (2006). Future global tropospheric ozone changes and impact on European air quality. *Geophysical Research Letters*, 33 (14), Art. No. L14805.
- TCHEPEL, O. (2003). Modelo de emissões para apoio à decisão na Gestão da Qualidade do Ar. Dissertação apresentada à Universidade Aveiro para obtenção do grau Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente, 213 p.
- TCHEPEL, O., MONTEIRO, A., BORREGO, C. (2007). Estimation of the modelling uncertainty related with stochastic processes. Accepted for oral presentation at the 29<sup>th</sup> Int. Technical Meeting on Air Pollution Modeling and Its Applications, 24-29 September, Aveiro, Portugal.
- TESCHE, T.W., GEORGOPOULOS, P., LURMANN, F.L., ROTH, P.M. (1990). Improvement of procedures for evaluating photochemical Models. Draft Final Report. California Air Resources Board, Sacramento.
- TESCHE, T.W., MORRIS, R., TONNESEN, G., MCNALLY, D., BOYLAN, J., BREWER P. (2006). CMAQ/CAMx annual 2002 performance evaluation over the Eastern US. *Atmospheric Environment*, 40 (26), 4906-4919.
- THOMPSON, M.L., REYNOLDS, J., COX, L.H., GUTTORP, P., SAMPSON, P.D. (2001). A review of statistical methods for the meteorological adjustment of tropospheric ozone. *Atmospheric Environment*, 35, 617-630.
- TRABAUD, L., CHRISTENSEN, N., GILL, A. (1993). Historical biogeography of fire in Temperate and Mediterranean ecosystems. The ecological, atmospheric and climatic importance of vegetation fires. Eds. Crutzen, P. and Goldammer, J. *Fire in the environment*. Wiley & Sons, 277-295.
- TROEN, I., MAHRT, L. (1986). A simple model of the atmospheric boundary layer: sensitivity to surface evaporation. *Boundary-Layer Meteorology*, 37, 129-148.
- THUNIS, P., ROUIL, L., CUVELIER, C., STERN, R., KERSCHBAUMER, A., BESSAGNET, B., SCHAAP, M., BUILTJES, P., TARRASON, L., DOUROS, J., MOUSSIOPOULOS, N., PIROVANO, G., BEDOGNI, M. (2007). Analysis of model responses to emission-reduction scenarios within the CityDelta project. *Atmospheric Environment*, 41, 208-220.
- TULET P., CRASSIER V., SOLMON F., GUEDALIA D., ROSSET R. (2003). Description of the Mesoscale Nonhydrostatic Chemistry model and application to a transboundary pollution episode between northern France and southern England. *Journal of Geophysical Research - Atmospheres*, 108, 4021.
- USEPA - U.S. Environmental Protection Agency (1999). Guideline for developing an ozone forecasting program. Report EPA-454/R-99-009.
- USEPA - U.S. Environmental Protection Agency (2000). Air Quality Index – A Guide to Air Quality and Your Health, EPA-454/R-00-005, EPA's Office of Air and Radiation.
- USEPA - U.S. Environmental Protection Agency (2004). Short Course on Air Quality Forecasting. In: Air Quality US National Conference, 22-25 February, Baltimore, EUA.
- VALENTE, J., MIRANDA, A.I., LOPES, A.G., BORREGO C., VIEGAS, D.X., LOPES, M. (2007). A local-scale modelling system to simulate smoke dispersion. *International Journal of Wildland Fire*, 16, 196-203.
- VAN AALST, R., EDWARDS, L., PULLES, T., DE SAEGER, E., TOMBROU, M., TONNESEN, D. (1998). Guidance Report on Preliminary Assessment under EC Air Quality Directives, Technical Report nº11, Environmental European Agency. Disponível em: [//reports.eea.europa.eu/TEC11a/en/tech11.pdf](http://reports.eea.europa.eu/TEC11a/en/tech11.pdf)

- VAN DIJCK, S., LAOUINA, A., CARVALHO, A., LOOS, S., SCHIPPER, A., KWAST, H., NAFAA R., ANTARI, M., ROCHA, A., BORREGO, C., RITSEMA, C. (2005). Desertification in Northern Morocco due to effects of climate change on groundwater recharge. Desertification in the Mediterranean Region. A Security Issue. Eds. Kepner, W., Rubio, J., Mouat, D., Pedrazzini, F., Springer New York, 614 p., ISBN:1-4020-3758-9.
- VAN DINGENEN, R., RAES, F., PUTAUD, J.P., BALTENSPERGER, U., CHARRON, A., FACCHINI, M.C., DECESARI, S., FUZZI, S., GEHRIG, R., HANSSON, H.C. *et al.* (2004). A European aerosol phenomenology-1: physical characteristics of particulate matter at kerbside, urban, rural and background sites in Europe, *Atmospheric Environment*, 38, 2561-2577.
- VAN LOON, M. (2004). Model intercomparison in the framework of the review of the unified EMEP model. Technical report TNO-MEP R2004/282, Apeldoorn, The Netherlands.
- VAN LOON, M., VAUTARD, R., SCHAAP, M., BERGSTRÖM, R., BESSAGNET, B., BRANDT, J., BUILTJS, P., CHRISTENSEN, J., CUVELIER, C., GRAFF, A., JONSON, J., KROL, M., LANGNER, J., ROBERTS, P., ROUIL, L., STERN, R., TARRASÓN, L., THUNIS, P., VIGNATI, E., WHITE, L., WINDA, P. (2007). Evaluation of long-term ozone simulations from seven regional air quality models and their ensemble. *Atmospheric Environment*, 41 (10), 2083-2097.
- VAUTARD, R., BEEKMANN, M., ROUX, J., GOMBERT, D. (2001). Validation of a deterministic forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area. *Atmospheric Environment*, 35, 2449-2461.
- VAUTARD, R., BEEKMANN, M., BESSAGNET, B., BLOND, N., HODZIC, A., HONORÉ, C., MALHERBE, L., MENUT, L., ROUIL, L., ROUX, J. (2004a). The use of MM5 for operational ozone/NO<sub>x</sub>/aerosols prediction in Europe: strengths and weaknesses of MM5. Paper 5<sup>th</sup> WRF /14<sup>th</sup> MM5, Users' Workshop NCAR, June 22-25, 2004. Disponível em: [www.mmm.ucar.edu/mm5/workshop/ws04/Session4/Vautard.Robert.pdf](http://www.mmm.ucar.edu/mm5/workshop/ws04/Session4/Vautard.Robert.pdf)
- VAUTARD, R., BESSAGNET, B., CHIN, M., MENUT, L. (2004b). On the contribution of natural Aeolian sources to particulate matter concentrations in Europe: testing hypotheses with a modelling approach. *Atmospheric Environment*, 39, 3291-3303.
- VAUTARD, R., HONORE, C., BEEKMANN, M., ROUIL, L. (2005). Simulation of ozone during the August 2003 heat wave and emission control scenarios. *Atmospheric Environment*, 39 (16), 2957-2967.
- VAUTARD, R., BUILTJES, P., THUNIS, P., CUVELIER, K., BEDOGNI, M., BESSAGNET, B., HONORÉ, C., MOUSSIOPOULOS, N., PIROVANO G., SCHAAP, M., STERN, R., TARRASON, L., VAN LOON, M. (2007). Evaluation and intercomparison of ozone and PM<sub>10</sub> simulations by several chemistry-transport models over 4 European cities within the City-Delta project, *Atmospheric Environment*, 41, 173-188.
- VELOSO, B., AZEVEDO, R., MONTEIRO, A., BORREGO, C. (2004). Métodos estatísticos na previsão da qualidade do ar para os centros urbanos do Porto e Lisboa. In: Actas da 8<sup>a</sup> Conferência Nacional de Ambiente, 27-29 de Outubro, Lisboa, Portugal, 381-382. Artigo publicado em CD-Rom.
- VERWER, J. (1994). Gauss-seidel iterations for stiff odes from chemical kinetics. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 15, 1243-1250.
- VESTRENG, V., BREIVIK, K., ADAMS, M., WAGENER, A., GOODWIN, J., ROZOVSKAYA, O., PACYNA, J.M. (2005). Inventory Review 2005, Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive, Initial review of HMs and POPs, Technical report MSC-W 1/2005, ISSN 0804-2446.
- VIEGAS, D.X. (1989) - Manual sobre Incêndios Florestais; Secretaria-Geral do Ministério do Planeamento e da Administração do Território, Lisboa.
- VISSCHEDIJK, A., DENIER VAN DER GON, H. (2005). Gridded European anthropogenic emission data for NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, NMVOC, NH<sub>3</sub>, CO, PPM<sub>10</sub>, PPM<sub>2.5</sub> and CH<sub>4</sub> for the year 2000, TNO-Report B&O-A R 2005/106.
- WANG J., CHRISTOPHER, S.A., NAIR, U.S., REID, J.S., PRINS, E.M., SZYKMAN, J., HAND, J.L. (2006). Mesoscale modeling of Central American smoke transport to the United States: 1. "Topdown" assessment of emission strength and diurnal variation impacts, *Journal of Geophysical Research*, 111 (D5), Art. No. D05S17.

WESELY, M. (1989). Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmospheric Environment*, 23, 1293-1304.

WOTAWA, G., TRAINER, M. (2000). The influence of Canadian forest fires on pollutant concentrations in the United States. *Science*, 288, 324-328.

ZHANG, N., VAUTARD, R., OANH, N. (2005). Comparison of two photochemical modeling systems in a tropical urban area. *Journal of Air & Waste Management Association*, 55 (7), 903-918.

ZANNETTI, P. (1990). *Air Pollution Modeling: Theories, Computational Methods and Available Software*. Computational Mechanics Publications, Southampton, UK, 444 p.

Consulta de sítios da internet (em Julho 2007)

URL1: <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/>

URL2: <http://www.weather.ul.pt/>.

URL3: <http://www.fis.ua.pt/torre/Yamazaki/modelos/>

URL4: <http://meteo.ist.utl.pt/>

URL5: <http://www.ineti.pt/>

URL6: <http://glcf.umiacs.umd.edu/>

URL7: <http://www.emep.int>

URL8: <http://www.air4eu.nl/>

URL9: <http://www.arl.noaa.gov/ready/hysplit4.html>

URL10: <http://earthobservatory.nasa.gov/>

URL11: <http://www.eurad.uni-koeln.de>

URL12: <http://euler.lmd.polytechnique.fr/pioneer/>

URL13: <http://ask.ii.uib.no/~climate/>

URL14: <http://www.aeat.co.uk/netcen/airqual/index.html>

URL15: [http://www.dmu.dk/1\\_viden/2\\_Miljoe-tilstand/3\\_luft/4\\_udsigt/](http://www.dmu.dk/1_viden/2_Miljoe-tilstand/3_luft/4_udsigt/)

URL16: <http://trumf.fu-berlin.de>

URL17: <http://www.airnow.gov>

URL18: <http://www.qualar.org/index.php?page=3>

URL19: <http://www ftp.ncep.noaa.gov/data/>

URL20: <http://gmt.soest.hawaii.edu/>

URL21: <http://www.dgrf.min-agricultura.pt>

URL22: [http://toms.gsfc.nasa.gov/aerosols/aerosols\\_v8.html](http://toms.gsfc.nasa.gov/aerosols/aerosols_v8.html)



URL23: <http://www.integaire.org/indexuk.html>

URL24: [http://www.london.gov.uk/mayor/environment/air\\_quality/construction-dust.jsp](http://www.london.gov.uk/mayor/environment/air_quality/construction-dust.jsp)



# Anexos



## Anexo I

### Legislação relativa à qualidade do ar

Na Tabela A.1 resume-se a legislação em vigor (valores limite e margens de tolerância) para cada um dos poluentes atmosféricos, nomeadamente SO<sub>2</sub>, CO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub> e PM<sub>2.5</sub>. A margem de tolerância indicada (percentagem do valor limite sobre a qual este pode ser ultrapassado) diz respeito ao ano de 2001, sendo aplicável numa percentagem anual idêntica, até atingir 0% em 2005.

Tabela A.1. Resumo dos valores limites definidos na legislação para os principais poluentes atmosféricos.

Parâmetros	Período amostragem	Valor limite ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	Nº excedências permitidas	Margem tolerância* (relativa a 2001)	Data de cumprimento
<b>SO<sub>2</sub> (DL nº 111/2002 de 16 Abril)</b>					
Protecção saúde humana	Média horária	350	24 vezes/ano	90 $\mu\text{g m}^{-3}$	1 Janeiro 2005
Protecção saúde humana	Média diária	125	3 vezes/ano	-	1 Janeiro 2005
Protecção vegetação	Média anual	20	-	-	em vigor
Protecção vegetação	Média Inverno	20	-	-	em vigor
<b>CO (DL nº 111/2002 de 16 Abril)</b>					
Protecção saúde humana	Média móvel 8h diária	10 $\text{mg m}^{-3}$	-	-	1 Jan 2010
<b>NO<sub>2</sub> (DL nº 111/2002 de 16 Abril)</b>					
Protecção saúde humana	Média horária	200	18 vezes/ano	80 $\mu\text{g m}^{-3}$	1 Janeiro 2010
Protecção saúde humana	Média anual	40	-	16 $\mu\text{g m}^{-3}$	1 Janeiro 2010
<b>O<sub>3</sub> (DL nº 320/2003 de 20 Dezembro)</b>					
Protecção saúde humana (valor alvo)	Média diária móvel 8h	120	25 vezes/ano	-	1 Janeiro 2010
Protecção vegetação (AOT40) (valor alvo)	Média horária (Maio-Julho)	18000 $\mu\text{g m}^{-3}\text{h}$	-	-	1 Janeiro 2010
Limiar de informação	Média horária	180	-	-	em vigor
Limiar de alerta	Média horária	240	3 h consecutivas	-	em vigor
<b>PM<sub>10</sub> (DL nº 111/2002 de 16 Abril)</b>					
Protecção saúde humana	Média diária	50	35 vezes/ano	15 $\mu\text{g m}^{-3}$	1 Janeiro 2005
Protecção saúde humana	Média anual	40	-	5 $\mu\text{g m}^{-3}$	1 Janeiro 2005
Protecção saúde humana	Média diária	50	7 vezes/ano	-	1 Janeiro 2010
Protecção saúde humana	Média anual	20	-	-	1 Janeiro 2010
<b>PM<sub>2.5</sub> (2005/0183 COD – proposta de directiva)</b>					
Protecção saúde humana	Média anual	25	-	20%	1 Janeiro 2010



## Anexo II

### Mecanismo químico do modelo CHIMERE: reações e espécies químicas simuladas

Tabela A.2. Lista das reacções incluídas no mecanismo químico MELCHIOR2 (fase gasosa).

Reacções	Constantes cinéticas
<b>Química inorgânica</b>	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,8e^{-12}$ , $B=1370$
$O_3 + NO \rightarrow NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,2e^{-13}$ , $B=2450$
$O_3 + NO_2 \rightarrow NO_3$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,9e^{-12}$ , $B=1000$
$O_3 + OH \rightarrow HO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,4e^{-14}$ , $B=600$
$O_3 + HO_2 \rightarrow OH + NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=3,7e^{-12}$ , $B=-240$
$NO_2 + OH + M \rightarrow HNO_3$	$*(3e^{-30}, 0,3,5e^{-11}, 0,1,4,0,3)$
$HO_2 + OH \rightarrow H_2O$	$Ae^{-B/T}$ , $A=4,8e^{-11}$ , $B=-250$
$H_2O_2 + OH \rightarrow HO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,9e^{-12}$ , $B=160$
$HNO_3 + OH \rightarrow NO_3$	$Ae^{-B/T}$ , $A=5,5e^{-15}$ , $B=-985$
$CO + OH \rightarrow HO_2 + CO_2$	$Ae^{-B/T(300/T)}$ , $A=2e^{-13}$ , $B=0$
$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,2e^{-13}$ , $B=-740$
$HO_2 + HO_2 + H_2O \rightarrow H_2O_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=4,5e^{-34}$ , $B=-2827$
$NO_3 + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	$4e^{-12}$
$NO_3 + H_2O_2 \rightarrow HNO_3 + HO_2$	$2e^{-15}$
$NO_3 + NO \rightarrow 2NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,8e^{-11}$ , $B=-110$
$NO_2 + NO_3 \rightarrow NO + NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=4,5e^{-14}$ , $B=1260$
$NO_2 + NO_3 + M \rightarrow N_2O_5$	$*(3e^{-30}, 0,3,2e^{-12}, 0, -0,2,0,3)$
$N_2O_5 + M \rightarrow NO_3 + NO_2$	$*(1e^{-3}, 11000, 3,10e^{14}, 11080, -0,1,0,3)$
$N_2O_5 + H_2O \rightarrow 2HNO_3$	$2,6e^{-22}$
$N_2O_5 + 2H_2O \rightarrow 2HNO_3$	$2e^{-39}$
$NO + OH + M \rightarrow HONO$	$*(7e^{-31}, 0,2,6,2e^{-11}, 0,0,5,0,6)$
$HONO + OH \rightarrow NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,8e^{-11}$ , $B=390$
$2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=3,3e^{-39}$ , $B=-530$
$NO_2 \rightarrow HONO$	$0,5*depo(NO_2)$
<b>Química do SO<sub>x</sub></b>	
$SO_2 + CH_3O_2 \rightarrow H_2SO_4 + HCHO + HO_2$	$4e^{-17}$
$SO_2 + OH + M \rightarrow H_2SO_4 + HO_2$	$*(4e^{-31}, 0,3,3,2e^{-12}, 0,0,0,45)$
<b>Reacção do OH com hidrocarbonetos</b>	
$CH_4 + OH \rightarrow CH_3O_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,3e^{-12}$ , $B=1765$
$C_2H_6 + OH \rightarrow CH_3CHO + ^\circ RO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=7,9e^{-12}$ , $B=1030$
$nC_4H_{10} + OH \rightarrow 0.9CH_3COE + 0.1CH_3CHO + 0.1CH_3COO + 0.9^\circ RO_2$	$Ae^{190/T(300/T)^2}$ , $A=1,3e^{-12}$
$C_2H_4 + OH + M^{**} \rightarrow 2HCHO + ^\circ RO_2$	$*(7e^{-29}, 0,3,1,9e^{-12}, 0,0,0,7)$
$C_3H_6 + OH + M \rightarrow HCHO + CH_3CHO + ^\circ RO_2$	$*(8e^{-27}, 0,3,5,3e^{-11}, 0,0,0,5)$
$OXYL + OH \rightarrow MEMALD + MGLYOX + ^\circ RO_2$	$1,37e^{-11}$
$C_5H_8 + OH \rightarrow 0.32MAC + 0.42MVK + 0.74HCHO$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,5e^{-11}$ , $B=-410$
$APINEN + OH \rightarrow 0.8CH_3CHO + 0.8CH_3COE$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,2e^{-11}$ , $B=-444$
<b>Reacção do OH com carbonilos e peróxidos</b>	
$HCHO + OH \rightarrow CO + HO_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=8,6e^{-12}$ , $B=-20$
$CH_3CHO + OH \rightarrow CH_3COO$	$Ae^{-B/T}$ , $A=5,6e^{-12}$ , $B=-310$
$MEMALD + OH \rightarrow GLYOX + MGLYOX + ^\circ RO_2$	$5,6e^{-11}$

$\text{CH}_3\text{COE} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COY} + {}^\circ\text{RO}_2$	$\text{Ae}^{414/T} (300/T)^2, A=2,9\text{e}^{-13}$
$\text{GLYOX} + \text{OH} \rightarrow 2\text{CO} + \text{HO}_2$	$1,1\text{e}^{-11}$
$\text{MGLYOX} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{CO}$	$1,5\text{e}^{-11}$
$\text{MVK} + \text{OH} \rightarrow$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,1\text{e}^{-12}, B=-453$
$0.3\text{MGLYOX} + 0.3\text{HCHO} + 0.7\text{CH}_3\text{CHO} + 0.7\text{CH}_3\text{COO} + 0.05\text{ISNI} + {}^\circ\text{RO}_2$	
$\text{MAC} + \text{OH} \rightarrow 0.5\text{CH}_3\text{COE} + 0.5\text{CO}_2 + 0.5{}^\circ\text{PAN}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,8\text{e}^{-11}, B=-175$
$\text{CH}_3\text{O}_2\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,9\text{e}^{-12}, B=-190$
$\text{PPA} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,9\text{e}^{-12}, B=-190$
$\text{CH}_3\text{O}_2\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{HCHO} + \text{OH}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,0\text{e}^{-12}, B=-190$
${}^\circ\text{ROOH} + \text{OH} \rightarrow 0.8\text{OH} + 0.2{}^\circ\text{RO}_2$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,35\text{e}^{-12}, B=-455$
${}_{\text{bio}}\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{OH}$	$8\text{e}^{-11}$
$\text{PANH} + \text{OH} \rightarrow 0.2{}^\circ\text{PAN}$	$1,64\text{e}^{-11}$
$\text{CARNIT} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{CO} + \text{NO}_2$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=5,6\text{e}^{-12}, B=-310$
<b>Reações entre NO<sub>3</sub> e hidrocarbonetos e aldeídos</b>	
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{NO}_3 \rightarrow 0.5\text{CARNIT} + \text{HCHO} + {}^\circ\text{RN1}$	$2\text{e}^{-16}$
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{NO}_3 \rightarrow 0.5\text{CARNIT} + 1.5\text{HCHO} + 0.5\text{CH}_3\text{CHO} + 0.5\text{HO}_2 + {}^\circ\text{RN1}$	$9,45\text{e}^{-15}$
$\text{APINEN} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{CH}_3\text{COE} + {}^\circ\text{RN1}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,2\text{e}^{-12}, B=490$
$\text{C}_5\text{H}_8 + \text{NO}_3 \rightarrow 0.9\text{ISNI} + 0.1\text{MAC} + 0.1\text{MVK} + 0.2\text{HCHO} + 0.8\text{HO}_2 + {}^\circ\text{RN1}$	$7,8\text{e}^{-13}$
$\text{HCHO} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CO} + \text{HNO}_3 + \text{HO}_2$	$5,8\text{e}^{-16}$
$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{HNO}_3$	$2,8\text{e}^{-15}$
$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{NO}_3 \rightarrow \text{HCHO} + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	$1,2\text{e}^{-12}$
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{NO}_2 + \text{CO}_2$	$4\text{e}^{-12}$
${}^\circ\text{RO}_2 + \text{NO}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$1,2\text{e}^{-12}$
${}^\circ\text{PAN} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$4\text{e}^{-12}$
${}^\circ\text{RN1} + \text{NO}_3 \rightarrow 1.5\text{NO}_2$	$1,2\text{e}^{-12}$
<b>Reações entre O<sub>3</sub> e hidrocarbonetos insaturados</b>	
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O}_3 \rightarrow \text{HCHO} + 0.12\text{HO}_2 + 0.13\text{H}_2 + 0.44\text{CO}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=9,1\text{e}^{-15}, B=2580$
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O}_3 \rightarrow$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=5,5\text{e}^{-15}, B=1880$
$0.5\text{HCHO} + 0.5\text{CH}_3\text{CHO} + 0.3\text{CH}_3\text{O}_2 + 0.3\text{HO}_2 + 0.2\text{OH} + 0.1\text{H}_2 + 0.4\text{CO} + 0.7\text{CH}_4$	
$\text{C}_5\text{H}_8 + \text{O}_3 \rightarrow$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,2\text{e}^{-14}, B=2013$
$0.67\text{MAC} + 0.26\text{MVK} + 0.55\text{OH} + 0.07\text{C}_3\text{H}_6 + 0.8\text{HCHO} + 0.06\text{HO}_2 + 0.05\text{CO} + 0.3\text{O}_3$	
$\text{MAC} + \text{O}_3 \rightarrow 0.8\text{MGLYOX} + 0.7\text{HCHO} + 0.215\text{OH} + 0.275\text{HO}_2 + 0.2\text{CO} + 0.2\text{O}_3$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=5,3\text{e}^{-15}, B=2520$
$\text{MVK} + \text{O}_3 \rightarrow$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,3\text{e}^{-15}, B=2016$
$0.8\text{MGLYOX} + 0.8\text{HCHO} + 0.04\text{CH}_3\text{COH} + 0.8\text{OH} + 0.06\text{HO}_2 + 0.1\text{CO} + 0.2\text{O}_3$	
$\text{APINEN} + \text{O}_3 \rightarrow$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,0\text{e}^{-15}, B=736$
$1.27\text{CH}_3\text{CHO} + 0.53\text{CH}_3\text{COE} + 0.14\text{CO} + 0.62{}^\circ\text{RO}_2 + 0.4\text{HCHO} + 0.8\text{OH} + 0.1\text{HO}_2$	
<b>Conversão do radical orgânico</b>	
$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{HCHO} + \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,2\text{e}^{-12}, B=-180$
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{NO}_2 + \text{CO}_2$	$2\text{e}^{-11}$
${}^\circ\text{RO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$4\text{e}^{-12}$
${}_{\text{bio}} + \text{NO} \rightarrow 0.86\text{NO}_2 + 0.78\text{HO}_2 + 0.14\text{ISNI}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=1,4\text{e}^{-11}, B=180$
${}^\circ\text{PAN} + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$1,4\text{e}^{-11}$
${}^\circ\text{RN1} + \text{NO} \rightarrow 1.5\text{NO}_2$	$4\text{e}^{-11}$
<b>Recombinação do radical orgânico</b>	
$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,1\text{e}^{-13}, B=-790$
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{HO}_2 \rightarrow 0.67\text{PPA} + 0.33\text{O}_3$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=4,3\text{e}^{-13}, B=-1040$
${}^\circ\text{RO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{ROOH}$	$\text{Ae}^{-B/T}, A=2,7\text{e}^{-13}, B=-1000$



$^{\circ}\text{bio} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{bioH}$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,7e^{-13}$ , $B=-1000$
$^{\circ}\text{PAN} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{PANH}$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,7e^{-13}$ , $B=-1000$
$^{\circ}\text{RN1} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{X}$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,7e^{-13}$ , $B=-1000$
$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow 1.35\text{HCHO} + 0.7\text{HO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,13e^{-13}$ , $B=-356$
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow 0.5\text{CH}_3\text{O}_2 + 0.5\text{CO}_2 + \text{HCHO} + 0.5\text{HO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=3,34e^{-12}$ , $B=-400$
$\text{RO}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow 0.65\text{HCHO} + 0.8\text{HO}_2 + 0.35\text{CH}_3\text{OH}$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,5e^{-13}$ , $B=-220$
$^{\circ}\text{bio} + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow 0.8\text{HO}_2 + 0.5\text{HCHO}$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,44e^{-11}$ , $B=223$
$^{\circ}\text{PAN} + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow \text{HCHO} + 0.5\text{HO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=7,9e^{-12}$ , $B=-140$
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{CH}_3\text{COO} \rightarrow 2\text{CH}_3\text{OO} + 2\text{CO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=2,8e^{-12}$ , $B=-530$
$^{\circ}\text{RO}_2 + \text{CH}_3\text{COO} \rightarrow 0.8\text{CH}_3\text{O}_2 + 0.8\text{CO}_2 + 0.8\text{HO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=8,6e^{-13}$ , $B=-260$
$^{\circ}\text{bio} + \text{CH}_3\text{COO} \rightarrow 0.5\text{HCHO} + 1.5\text{HO}_2 + 0.7\text{CO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=1,2e^{-11}$ , $B=127$
$^{\circ}\text{PAN} + \text{CH}_3\text{COO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CO}_2 + \text{HO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=3,34e^{-12}$ , $B=-400$
$^{\circ}\text{RO}_2 + \text{RO}_2 \rightarrow 1.3\text{HO}_2$	$8,4e^{-14}$
<b>Nitratos e pernitratos orgânicos</b>	
$\text{CH}_3\text{COO} + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{PAN}$	$*(3e^{-28}, 0,7, 1,1, 2e^{-11}, 0,0,9,0,3)$
$\text{PAN} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{NO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=9,5e^{-13}$ , $B=650$
$^{\circ}\text{PAN} + \text{OH} \rightarrow \text{HCHO} + \text{NO}_3 + \text{CO}_2$	$Ae^{-B/T}$ , $A=3,2e^{-13}$ , $B=-500$
$\text{ISNI} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + 0.5\text{CH}_3\text{COE} + 0.5\text{MGLYOX} + 0.05\text{ISNI} + 0.05\text{HO}_2 + ^{\circ}\text{RN1}$	$3,4e^{-11}$
<b>Reações fotoquímicas</b>	
$\text{O}_3 \rightarrow 2\text{OH}$	Taxa fotólise
$\text{NO}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{O}_3$	Taxa fotólise
$\text{NO}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_3$	Taxa fotólise
$\text{NO}_3 \rightarrow \text{NO}$	Taxa fotólise
$\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{NO}_3$	Taxa fotólise
$\text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{OH}$	Taxa fotólise
$\text{HNO}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{OH}$	Taxa fotólise
$\text{HONO} \rightarrow \text{NO} + \text{OH}$	Taxa fotólise
$\text{HCHO} \rightarrow \text{CO} + 2\text{HO}_2$	Taxa fotólise
$\text{HCHO} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	Taxa fotólise
$\text{CH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	Taxa fotólise
$\text{CH}_3\text{COE} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{CH}_3\text{CHO} + ^{\circ}\text{RO}_2$	Taxa fotólise
$\text{CH}_3\text{COY} \rightarrow 2\text{CH}_3\text{COO}$	Taxa fotólise
$\text{MGLYOX} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{HO}_2 + \text{CO}$	Taxa fotólise
$\text{GLYOX} \rightarrow 0.6\text{HO}_2 + 2\text{CO} + 0.7\text{H}_2$	Taxa fotólise
$\text{MEMALD} \rightarrow 0.5\text{MVK} + 0.5\text{MALEIC} + 0.5^{\circ}\text{PAN} + 0.5\text{HCHO} + 0.5\text{HO}_2$	Taxa fotólise
$\text{CH}_3\text{O}_2\text{H} \rightarrow \text{HCHO} + \text{OH} + \text{HO}_2$	Taxa fotólise
$\text{PPA} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{CO}_2 + \text{OH}$	Taxa fotólise
$^{\circ}\text{ROOH} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	Taxa fotólise
$^{\circ}\text{bioH} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	Taxa fotólise
$\text{PANH} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	Taxa fotólise
$\text{PAN} \rightarrow \text{CH}_3\text{COO} + \text{NO}_2$	Taxa fotólise

$$k = \frac{k_o[M]}{1 + \frac{k_o[M]}{k_{\infty}}} f^p$$

$$\text{sendo } p = (1 + (\log_{10}(k_o[M]/k_{\infty}))^2)^{-1} \quad k_o = A_o e^{\left(\frac{-B_o}{T}\right)} \left(\frac{T}{300}\right)^{-n} \quad e \quad k_{\infty} = A_{\infty} e^{\left(\frac{-B_{\infty}}{T}\right)} \left(\frac{T}{300}\right)^{-n}$$

Os parâmetros são dados pela ordem  $A_o, B_o, n, A_{\infty}, B_{\infty}, m, f$

\*\*M (ar)=80%N<sub>2</sub> + 20%O<sub>2</sub>

Na Tabela A.3 estão listadas as espécies químicas simuladas pelo modelo químico CHIMERE, quando incluído o módulo de aerossóis.

Tabela A.3. Lista de espécies simuladas pelo modelo CHIMERE.

Nº	Espécie	Nome
1	O <sub>3</sub>	Ozono
2	NO <sub>2</sub>	Dióxido de azoto
3	NO	Óxido de azoto
4	PAN	Peroxiacetilnitrato
5	HNO <sub>3</sub>	Ácido nítrico
6	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	Peróxido de hidrogénio
7	HONO	Ácido nitroso
8	SO <sub>2</sub>	Dióxido de enxofre
9	CO	Monóxido de carbono
10	CH <sub>4</sub>	Metano
11	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Etano
12	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Butano
13	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	Eteno
14	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	Propeno
15	OXYL	o-xileno
16	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>	Isopreno
17	APINEN	α-pineno
18	HCHO	Formaldeído
19	CH <sub>3</sub> CHO	Acetaldeído
20	GLYOX	Glioxal
21	MGLYOX	Metil glioxal
22	CH <sub>3</sub> COE	Dimetil glioxal
23	PM <sub>10</sub>	Partículas em suspensão < 10 μm
24	PM <sub>2,5</sub>	Partículas em suspensão < 2,5 μm
25	PPM	Partículas primárias em suspensão
26	DUST	Poeiras
27	SOA	Aerossol orgânico secundário
28	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Ácido sulfúrico
29	HNO <sub>3</sub>	Ácido nítrico
30	NH <sub>3</sub>	Amoníaco
31	H <sub>2</sub> O	Água

## Anexo III

### Inventário de emissões para Portugal

Na Tabela A.4 apresentam-se as emissões totais nacionais (NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, COVNM, CO, NH<sub>3</sub> e PM<sub>10</sub>) estimadas para os anos de 2001, 2002 e 2003, para cada uma das actividades SNAP. Estes inventários foram elaborados pela Agência Portuguesa do Ambiente [IA, 2005b] e podem também ser encontrados na base de dados do EMEP [EMEP, URL7].

Tabela A.4. Inventário de emissões por tipo de actividade e por poluente, para 2001, 2002 e 2003.

Actividade	NO <sub>x</sub> (t ano <sup>-1</sup> )			SO <sub>2</sub> (t ano <sup>-1</sup> )			COVNM (t ano <sup>-1</sup> )		
	2001	2002	2003	2001	2002	2003	2001	2002	2003
Produção de energia	62 800	72 129	56 908	184 568	189 015	127 007	769	944	782
Combustão residencial e comercial	24 848	23 909	27 148	6 980	5 942	3 118	20 871	20 805	21 431
Combustão industrial	52 868	52 833	50 134	72 505	66 952	37 959	11 989	12 235	12 378
Processos de produção	4 082	3 914	3 847	23 935	18 969	19 676	46 052	34 101	34 420
Extracção/distribuição de combustíveis	0	0	0	0	0	0	12 228	24 148	25 180
Uso de solventes	0	0	0	0	0	0	101 899	104 608	106 833
Transportes rodoviários	110 001	108 194	104 789	3 306	3 371	3 377	53 673	63 810	60 266
Outras fontes móveis	29 143	29 927	25 320	982	2 599	1 416	2 993	3 130	2 581
Tratamento de resíduos	734	782	765	1 481	506	536	6 758	7 251	7 286
Agricultura	1 980	1 882	1 890	0	0	0	35 803	26 678	26 696
<b>Total</b>	<b>286 456</b>	<b>293 570</b>	<b>270 801</b>	<b>293 757</b>	<b>287 354</b>	<b>193 089</b>	<b>293 035</b>	<b>297 710</b>	<b>297 853</b>
Actividade	CO (t ano <sup>-1</sup> )			NH <sub>3</sub> (t ano <sup>-1</sup> )			PM <sub>10</sub> (t ano <sup>-1</sup> )		
	2001	2002	2003	2001	2002	2003	2001	2002	2003
Produção de energia	3 835	4 597	3 783	0	0	0	4 634	4 610	3 580
Combustão residencial e comercial	248 331	248 201	252 284	0	0	0	21 086	21 029	21 644
Combustão industrial	28 667	26 183	25 696	731	741	724	22 899	23 924	23 813
Processos de produção	62 153	55 754	58 945	3 564	3 675	3 793	61 290	50 689	53 211
Extracção/distribuição de combustíveis	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Uso de solventes	0	0	0	0	0	0	3 167	1 622	1 690
Transportes rodoviários	331 746	327 739	308 351	1 549	1 704	1 707	8 212	7 916	7 597
Outras fontes móveis	8 073	8 338	6 914	2	2	2	2 436	2 665	2 281
Tratamento de resíduos	1 172	1 614	1 613	8 257	8 102	8 029	221	305	304
Agricultura	16 832	16 206	16 281	51 463	50 200	50 114	3 257	3 263	3 278
<b>Total</b>	<b>700 809</b>	<b>688 632</b>	<b>673 867</b>	<b>65 566</b>	<b>64 424</b>	<b>64 369</b>	<b>127 202</b>	<b>116 023</b>	<b>117 398</b>



## Anexo IV

### Validação do modelo CHIMERE – aplicação ano 2004

Nas Tabelas A.5 e A.6 apresenta-se a análise estatística relativa à validação da aplicação do sistema de modelos MM5-CHIMERE para o ano de 2004, para  $O_3$  e  $PM_{10}$ , respectivamente. Os parâmetros usados (EQM, BIAS e r) são os mesmos aplicados para 2001 e discutidos na Secção 4.1.2.

Tabela A.5. Avaliação estatística do desempenho do sistema de modelos relativamente ao  $O_3$ , para 2004.

Longitude	Latitude	Tipo influência	Tipo Ambiente	Estação	Erro Quadrático Médio (EQM)	Erro Sistemático (BIAS)	Factor Correlação (r)
-8,58	40,80	Fundo	Rural	AVA	24,6	-5,9	0,81
-8,47	39,35	Fundo	Rural	CHA	29,8	-14,5	0,71
-8,89	39,92	Fundo	Rural	ERV	18,7	1,80	0,75
-7,30	40,23	Fundo	Rural	FUN	28,5	-20,0	0,63
-8,53	41,39	Fundo	Rural	LEC	24,6	-11,4	0,85
-8,45	41,57	Fundo	Suburbana	HRT	48,7	-30,6	0,66
-8,67	40,59	Fundo	Suburbana	ILH	20,0	1,3	0,80
-8,65	41,25	Fundo	Suburbana	VNT	26,6	-3,6	0,56
-9,08	38,63	Fundo	Urbana	ALF	24,1	-0,5	0,75
-8,89	38,53	Fundo	Urbana	ARC	26,6	3,0	0,64
-9,11	38,73	Fundo	Urbana	BEA	22,2	2,2	0,73
-8,55	41,22	Fundo	Urbana	ERM	27,6	-7,6	0,69
-8,41	40,21	Fundo	Urbana	COI-IG	22,4	-8,6	0,81
-9,16	38,66	Fundo	Urbana	LAR	22,2	0,4	0,73
-8,38	41,27	Fundo	Urbana	LAT	33,7	-21,2	0,83
-9,32	38,70	Fundo	Urbana	MARQ	22,9	-3,3	0,71
-9,35	38,78	Fundo	Urbana	MEM	19,6	-1,0	0,71
-9,11	38,77	Fundo	Urbana	OLI	23,6	2,9	0,72
-9,23	38,75	Fundo	Urbana	REB	23,6	-7,4	0,72
-9,21	38,71	Fundo	Urbana	RES	28,9	-16,4	0,69
-8,48	41,35	Fundo	Urbana	STIR	26,0	-10,3	0,87
-8,72	37,87	Industrial	Rural	SON	30,7	-16,5	0,60
-8,65	41,21	Industrial	Suburbana	CUS	28,9	-11,0	0,59
-8,84	37,95	Industrial	Suburbana	MCH	35,4	20,7	0,46
-8,71	41,23	Industrial	Suburbana	PER	23,4	-6,9	0,56
-8,58	40,75	Industrial	Suburbana	TEI	29,8	-7,5	0,69
-9,07	38,66	Industrial	Urbana	ESC	27,7	15,7	0,73
-8,74	41,34	Tráfego	Suburbana	VCON	24,2	16,2	0,70
-8,59	41,16	Tráfego	Urbana	ANT	28,3	-6,7	0,60
-8,55	41,19	Tráfego	Urbana	BAG	25,5	-8,3	0,66
-8,65	41,16	Tráfego	Urbana	BOA	24,6	11,8	0,55
-9,15	38,75	Tráfego	Urbana	ENT	25,2	11,7	0,58
-8,64	41,01	Tráfego	Urbana	ESP	22,1	9,4	0,71
-7,93	37,02	Tráfego	Urbana	AFS	36,5	13,9	0,38
-9,07	38,65	Tráfego	Urbana	HVE	24,4	5,8	0,74
-8,68	41,18	Tráfego	Urbana	MAT	19,8	6,3	0,61
-9,18	38,80	Tráfego	Urbana	ODI	23,1	-3,8	0,70
-8,63	41,23	Tráfego	Urbana	VER	26,3	-8,0	0,67
<b>Média</b>					<b>26,3</b>	<b>-2,8</b>	<b>0,68</b>

Tabela A.6. Avaliação estatística do desempenho do sistema de modelos relativamente a  $PM_{10}$ , para 2004.

Longitude	Latitude	Tipo Influência	Tipo Ambiente	Estação	Erro Quadrático Médio (EQM)	Erro Sistemático (BIAS)	Factor Correlação (r)
-8,47	39,35	Fundo	Rural	CHA	12,9	-9,9	0,98
-7,30	40,23	Fundo	Rural	FUN	20,5	-16,1	0,57
-8,63	41,22	Fundo	Suburbana	LEC	51,2	33,9	0,73
-8,65	41,25	Fundo	Suburbana	VNT	33,7	15,9	0,70
-8,55	41,22	Fundo	Urbana	ERM	56,3	37,3	0,65
-9,16	38,66	Fundo	Urbana	LAR	18,9	-9,4	0,64
-8,38	41,27	Fundo	Urbana	LAT	24,2	-19,1	0,67
-9,17	38,83	Fundo	Urbana	LOU	21,7	-16,3	0,61
-9,32	38,70	Fundo	Urbana	MARQ	22,8	-15,2	0,46
-9,35	38,78	Fundo	Urbana	MEM	14,9	-11,4	0,56
-9,11	38,77	Fundo	Urbana	OLI	20,4	-15,2	0,86
-9,23	38,75	Fundo	Urbana	REB	27,3	-17,4	0,51
-8,65	41,21	Industrial	Suburbana	CUS	36,3	17,1	0,71
-8,71	41,23	Industrial	Suburbana	PER	31,2	2,7	0,51
-8,58	40,75	Industrial	Suburbana	TEI	21,1	-17,4	0,74
-9,07	38,66	Industrial	Urbana	ESC	29,2	-21,6	0,55
-8,74	41,34	Tráfego	Suburbana	VCON	40,9	-37,5	0,41
-8,59	41,16	Tráfego	Urbana	ANT	30,6	13,1	0,74
-8,65	40,64	Tráfego	Urbana	AVE	16,3	-11,2	0,58
-9,15	38,72	Tráfego	Urbana	AVL	27,1	-21,2	0,62
-8,65	41,16	Tráfego	Urbana	BOA	33,0	-16,9	0,61
-9,42	38,70	Tráfego	Urbana	CASC	30,1	-26,6	0,60
-9,15	38,75	Tráfego	Urbana	ENT	23,8	-20,5	0,95
-8,64	41,01	Tráfego	Urbana	ESP	32,5	-29,4	0,69
-7,93	37,02	Tráfego	Urbana	AFS	43,6	-27,5	0,96
-8,68	41,18	Tráfego	Urbana	MAT	24,8	-1,8	0,64
-9,18	38,80	Tráfego	Urbana	ODI	24,5	-17,4	0,67
-8,34	41,21	Tráfego	Urbana	PAR	29,1	-24,6	0,55
-8,89	38,52	Tráfego	Urbana	QUE	30,1	-23,1	0,47
-8,64	41,19	Tráfego	Urbana	SHR	32,4	14,7	0,66
<b>Média</b>					<b>28,7</b>	<b>-9,7</b>	<b>0,65</b>

Tabela A.7. Estimativa da incerteza de acordo com o parâmetro RPE, relativo à 26ª máxima média octo-horária diária de O<sub>3</sub>.

Longitude	Latitude	Tipo influência	Tipo Ambiente	Estação	26ª Máxima média 8h observada ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	26ª Máxima média 8h simulada ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	RPE
-9,08	38,63	Fundo	Urbana	ALF	107	78	0,27
-8,89	38,53	Fundo	Urbana	ARC	156	117	0,25
-8,58	40,8	Fundo	Rural	AVA	112	80	0,29
-9,11	38,73	Fundo	Urbana	BEA	89	84	0,06
-8,47	39,35	Fundo	Rural	CHA	129	112	0,13
-8,41	40,21	Fundo	Urbana	COI-IG	128	83	0,35
-8,55	41,22	Fundo	Urbana	ERM	149	115	0,23
-8,89	39,92	Fundo	Rural	ERV	106	119	0,12
-7,3	40,23	Fundo	Rural	FUN	185	118	0,36
-8,45	41,57	Fundo	Suburbana	HRT	126	121	0,04
-8,67	40,59	Fundo	Suburbana	ILH	129	106	0,18
-9,16	38,66	Fundo	Urbana	LAR	155	115	0,26
-8,38	41,27	Fundo	Urbana	LAT	151	111	0,26
-8,53	41,39	Fundo	Rural	LEC	146	110	0,25
-9,32	38,7	Fundo	Urbana	MARQ	102	88	0,14
-9,35	38,78	Fundo	Urbana	MEM	146	109	0,25
-9,11	38,77	Fundo	Urbana	OLI	139	90	0,35
-9,23	38,75	Fundo	Urbana	REB	135	96	0,29
-9,21	38,71	Fundo	Urbana	RES	136	93	0,32
-8,48	41,35	Fundo	Urbana	STIR	147	119	0,19
-8,65	41,25	Fundo	Suburbana	VNT	117	130	0,11
-8,65	41,21	Industrial	Suburbana	CUS	100	104	0,04
-9,07	38,66	Industrial	Urbana	ESC	111	105	0,05
-8,84	37,95	Industrial	Suburbana	MCH	150	125	0,17
-8,71	41,23	Industrial	Suburbana	PER	148	101	0,32
-8,72	37,87	Industrial	Rural	SON	153	118	0,23
-8,58	40,75	Industrial	Suburbana	TEI	109	118	0,08
-7,93	37,02	Tráfego	Urbana	AFS	117	130	0,11
-8,59	41,16	Tráfego	Urbana	ANT	131	115	0,12
-8,55	41,19	Tráfego	Urbana	BAG	136	109	0,20
-8,65	41,16	Tráfego	Urbana	BOA	166	122	0,27
-9,15	38,75	Tráfego	Urbana	ENT	124	83	0,33
-8,64	41,01	Tráfego	Urbana	ESP	142	113	0,20
-9,07	38,65	Tráfego	Urbana	HVE	144	114	0,21
-8,68	41,18	Tráfego	Urbana	MAT	126	114	0,10
-9,18	38,8	Tráfego	Urbana	ODI	135	113	0,16
-8,74	41,34	Tráfego	Suburbana	VCON	125	83	0,34
-8,63	41,23	Tráfego	Urbana	VER	120	87	0,28
<b>Média</b>							<b>0,21</b>

Tabela A.8. Estimativa da incerteza de acordo com o parâmetro RPE, relativo à média anual de PM<sub>10</sub>.

Longitude	Latitude	Tipo Influência	Tipo Ambiente	Estação	Média anual observada ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	Média anual simulada ( $\mu\text{g m}^{-3}$ )	RPE
-8,47	39,35	Fundo	Rural	CHA	42,00	22,50	0,46
-8,55	41,22	Fundo	Urbana	ERM	47,30	22,50	0,52
-7,30	40,23	Fundo	Rural	FUN	52,00	29,60	0,43
-9,16	38,66	Fundo	Urbana	LAR	15,10	8,40	0,44
-8,38	41,27	Fundo	Urbana	LAT	30,60	25,10	0,18
-8,63	41,22	Fundo	Suburbana	LEC	33,20	23,40	0,30
-9,17	38,83	Fundo	Urbana	LOU	34,90	68,10	0,95
-9,32	38,70	Fundo	Urbana	MARQ	32,30	19,00	0,41
-9,35	38,78	Fundo	Urbana	MEM	42,20	42,30	0,00
-9,11	38,77	Fundo	Urbana	OLI	37,80	26,10	0,31
-9,23	38,75	Fundo	Urbana	REB	39,80	16,50	0,59
-8,65	41,25	Fundo	Suburbana	VNT	52,80	21,70	0,59
-8,65	41,21	Industrial	Suburbana	CUS	20,90	11,20	0,46
-9,07	38,66	Industrial	Urbana	ESC	36,80	61,80	0,68
-8,71	41,23	Industrial	Suburbana	PER	43,40	14,90	0,66
-8,58	40,75	Industrial	Suburbana	TEI	37,50	52,40	0,40
-7,93	37,02	Tráfego	Urbana	AFS	35,60	25,50	0,28
-8,59	41,16	Tráfego	Urbana	ANT	41,20	54,10	0,31
-8,65	40,64	Tráfego	Urbana	AVE	37,90	16,50	0,56
-9,15	38,72	Tráfego	Urbana	AVL	51,30	20,40	0,60
-8,65	41,16	Tráfego	Urbana	BOA	51,10	40,30	0,21
-9,42	38,70	Tráfego	Urbana	CASC	32,30	12,40	0,62
-9,15	38,75	Tráfego	Urbana	ENT	40,80	60,50	0,48
-8,64	41,01	Tráfego	Urbana	ESP	41,00	21,10	0,49
-8,68	41,18	Tráfego	Urbana	MAT	32,20	21,30	0,34
-9,18	38,80	Tráfego	Urbana	ODI	26,00	14,30	0,45
-8,34	41,21	Tráfego	Urbana	PAR	31,70	18,40	0,42
-8,89	38,52	Tráfego	Urbana	QUE	39,50	44,50	0,13
-8,64	41,19	Tráfego	Urbana	SHR	32,90	20,60	0,37
-8,74	41,34	Tráfego	Suburbana	VCON	41,30	26,20	0,37
<b>Média</b>							<b>0,44</b>



## Anexo V

### Correlações obtidas na previsão estatística

As Tabelas A9, A10 e A11, apresentam as correlações parciais entre as concentrações máximas de  $O_3$  e médias  $PM_{10}$  e as variáveis independentes usadas para a elaboração dos modelos estatísticos, para cada uma das estações de monitorização e ano de estudo.

Estas variáveis compreendem parâmetros meteorológicos (temperatura média, mínima e máxima; temperatura de ponto de orvalho, humidade relativa e velocidade do vento) e de qualidade do ar (concentração do dia anterior: O3dA e PTdA).

As correlações parciais apresentadas estiveram na origem da elaboração dos modelos de regressão múltipla desenvolvidos para o  $O_3$  (Tabela 6.2) e para as  $PM_{10}$  (Tabela 6.5).

Tabela A9. Correlações parciais entre a concentração máxima diária de  $O_3$  e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto

Estações/ano			Tmed	Tmax	Td max*	HR	Vvento	O3dA
Lisboa	BEA	1999	0,55	0,54	0,32	-0,40	-0,07	0,66
		2000	0,40	0,44	0,06	-0,57	0,01	0,73
		2001	0,56	0,59	0,26	-0,47	0,02	0,75
		2002	0,48	0,53	0,01	-0,67	0,19	0,74
	ENT	1999	0,34	0,37	0,11	-0,46	0,23	0,69
		2000	0,51	0,51	0,18	-0,56	0,20	0,63
		2001	0,30	0,33	-0,02	-0,47	0,12	0,67
		2002	0,23	0,27	-0,34	0,04	0,27	0,59
Porto	CUS	1999	0,49	0,49	-	-0,22	0,04	0,60
		2000	0,61	0,63	-	-0,18	-0,04	0,65
		2001	-0,01	0,06	-	0,04	0,16	0,82
		2002	0,20	0,30	-	-0,03	-0,09	0,65
	VNT	1999	0,36	0,41	-	-0,46	0,03	0,60
		2000	0,44	0,51	-	-0,46	0,01	0,68
		2001	0,62	0,66	-	-0,36	-0,22	0,76
		2002	0,35	0,46	-	-0,49	-0,03	0,62

\* Não existe esta variável meteorológica para o Porto nos dados obtidos

Tabela A10. Correlações parciais entre a concentração máxima octo-horária de O<sub>3</sub> e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto

Estações/ano			Tmed	Tmax	Td max*	HR	Vvento	O3dA
Lisboa	BEA	1999	0,58	0,56	0,37	-0,42	0,22	0,71
		2000	0,40	0,42	0,13	-0,56	0,13	0,77
		2001	0,51	0,53	0,29	-0,48	0,13	0,79
		2002	0,49	0,52	0,08	-0,68	0,29	0,77
	ENT	1999	0,38	0,41	0,14	-0,48	0,29	0,73
		2000	0,56	0,55	0,24	-0,56	0,29	0,66
		2001	0,29	0,32	-0,04	-0,49	0,19	0,69
		2002	0,25	0,27	-0,32	-0,64	0,37	0,65
Porto	CUS	1999	0,44	0,41	-	-0,22	0,14	0,68
		2000	0,69	0,68	-	-0,40	0,10	0,75
		2001	0,07	0,09	-	-0,13	0,48	0,82
		2002	0,19	0,28	-	-0,44	0,20	0,73
	VNT	1999	0,42	0,43	-	-0,40	0,07	0,72
		2000	0,50	0,53	-	-0,46	0,08	0,76
		2001	0,63	0,65	-	-0,34	-0,18	0,80
		2002	0,32	0,41	-	-0,49	0,05	0,70

\* Não existe esta variável meteorológica para o Porto nos dados obtidos

Tabela A11. Correlações parciais entre a concentração médias diárias de PM<sub>10</sub> e as variáveis (meteorológicas e qualidade do ar), para Lisboa e Porto

Estações/ano			Tmed	Tmin	Tmax	HR	Vvento	PT dA
Lisboa*	AVL	1999	0,03	-0,07	0,13	-0,11	-0,68	0,65
		2000	-0,10	-0,22	-0,01	-0,14	-0,36	0,60
		2001	0,07	-0,04	0,15	-0,14	-0,46	0,61
		2002	-0,03	-0,16	0,13	-0,10	-0,29	0,53
	ENT	1999	0,02	-0,05	0,08	0,17	-0,50	0,63
		2000	-0,29	-0,40	-0,20	0,08	-0,43	0,67
		2001	0,38	0,28	0,42	-0,09	-0,47	0,70
		2002	-0,06	-0,19	0,05	0,07	-0,31	0,57
Porto	CUS	1999	-0,14	-0,32	0,04	-0,32	-0,31	0,67
		2000	-0,18	-0,33	-0,05	-0,29	-0,20	0,71
		2001	0,00	-0,16	0,14	-0,25	-0,27	0,71
		2002	0,23	0,02	0,36	-0,24	-0,26	0,67
	VNT	1999	0,04	-0,12	0,20	-0,23	-0,41	0,62
		2000	0,00	-0,17	0,14	-0,23	-0,35	0,70
		2001	0,00	-0,16	0,15	-0,24	-0,38	0,69
		2002	0,17	0,01	0,29	-0,20	-0,28	0,59

\* A variável Td não foi introduzida no estudo das partículas por apresentar sempre correlações muito baixas

## Anexo VI

### Validação do modelo MM5

Na Figura A.1 apresenta-se a validação do modelo meteorológico MM5 para o período de Verão (Abril - Setembro 2006) e Inverno (Outubro 2006 - Março 2007), separadamente. As variáveis meteorológicas analisadas compreendem a temperatura superficial e as componentes zonal e meridional do vento. Os parâmetros estatísticos usados são o factor de correlação e o EQM, de acordo com o efectuado na Secção 6.4.1.

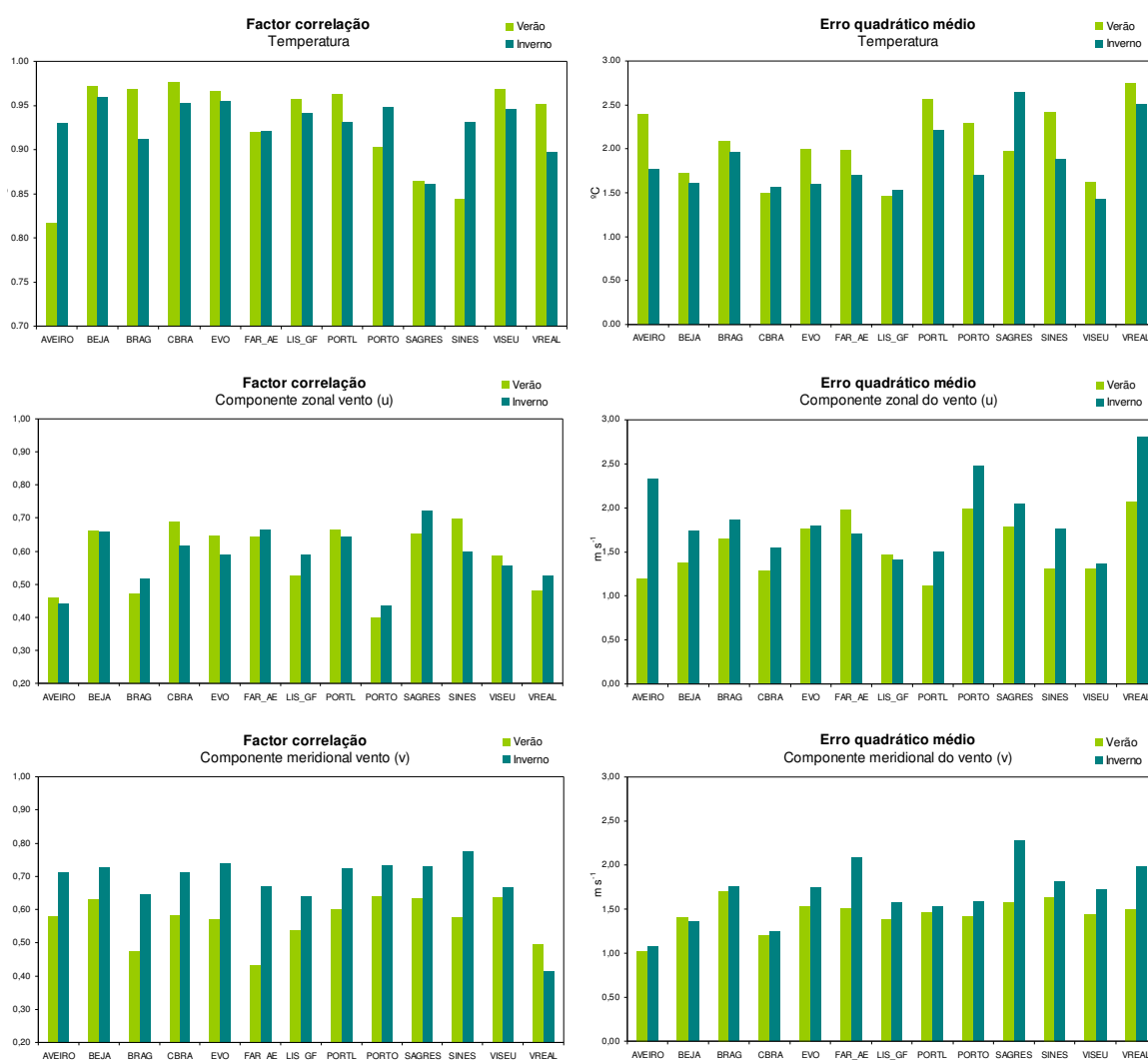


Figura A.1. Comparação entre o desempenho do modelo MM5 no período de Verão e Inverno, na previsão da temperatura, componente zonal e meridional do vento.

A Figura A.2 compara os perfis médios diários de temperatura e velocidade do vento observados e previstos pelo modelo meteorológico MM5, para o período de Verão e Inverno, para as restantes estações não apresentadas na Secção 6.4.1 (Figura 6.9 e 6.10).

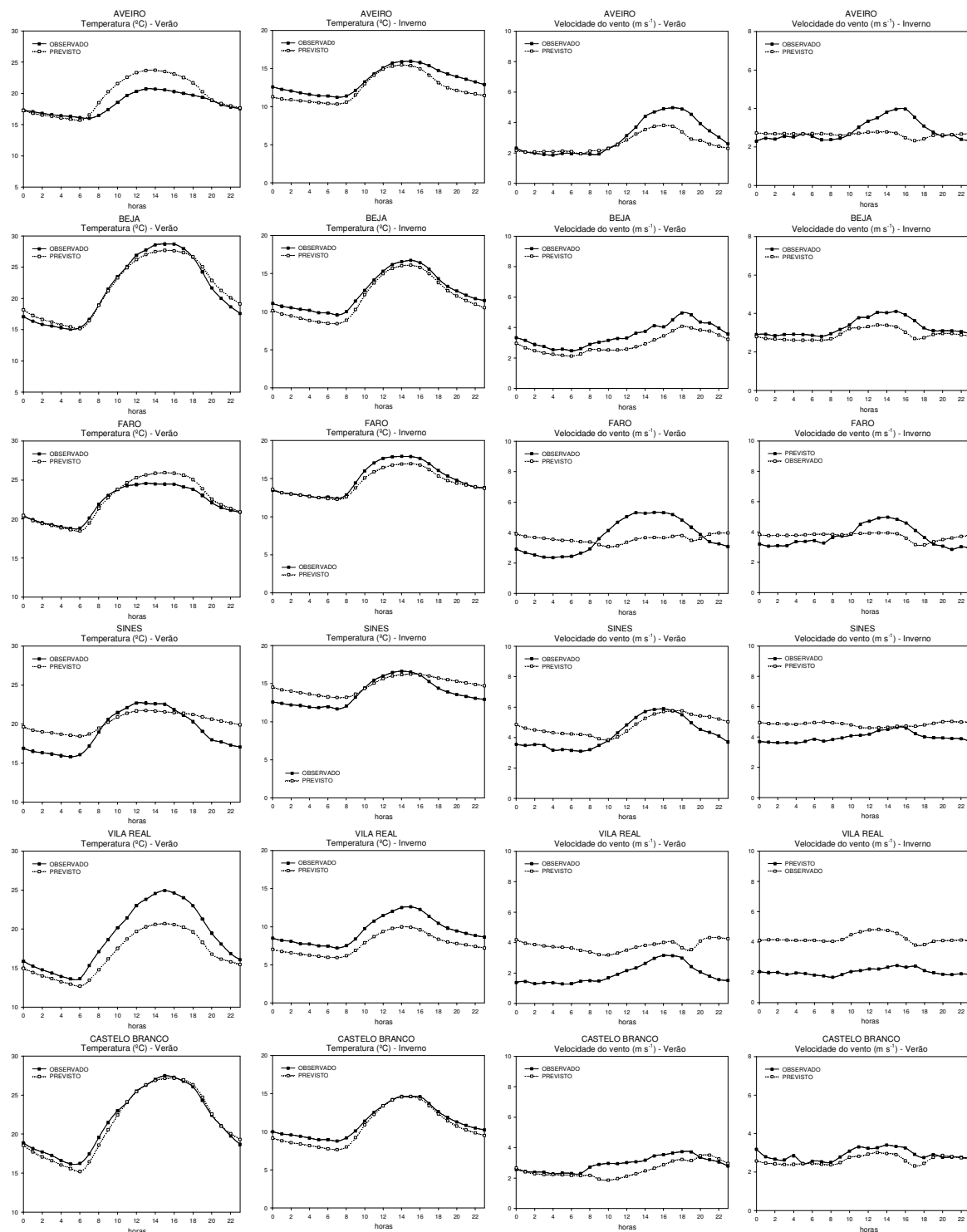


Figura A.2. Comparação entre os perfis diários de temperatura e velocidade do vento observados e previstos, para o Verão (Abril 06-Setembro 06) e Inverno (Outubro 06-Março 07).